



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación y Mejora de la Calidad Docente

Convocatoria 2015

Nº de proyecto: 28

“Innovación docente para sentar las bases docentes de la competición Chem-E-Car en España (Parte 2)”

Nombre del responsable del proyecto: Carlos Negro Álvarez

Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Ingeniería Química

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto (Máximo 2 folios)

El objetivo principal de este proyecto es la preparación de grupos de alumnos para la concepción y diseño de un prototipo teórico de Chem-E-Car, que cumpla todos los estándares del concurso Chem-E-Car organizado por AIChE, utilizando el material docente y las bases para la competición desarrollados por el equipo investigador en el PIMCD 103 de la convocatoria 2014. Para alcanzar este objetivo se han establecido los siguientes objetivos específicos:

Objetivo 1: Preparación y celebración de un seminario en el que se informará a los alumnos interesados sobre el concurso Chem-E-Car y el material de ayuda del que disponen.

Objetivo 2: Formación de grupos interdisciplinarios respetando las normas aplicables a grupos del concurso Chem-E-Car.

Objetivo 3: Ampliación de la base de datos de reacciones químicas, incorporando nuevos medios de impulsión, control y frenado, mediante reacciones químicas seguras y que transcurran a temperatura ambiente o cercana a la misma y a presión atmosférica o similar, que puedan ser utilizadas para generar una fuerza motriz o para interrumpir esta. Este objetivo pretende la concienciación del estudiante acerca del tipo de reacción a utilizar para el futuro Chem-E-Car.

Objetivo 4: Generación de material docente y bibliográfico necesario para el aprendizaje autodidacta del estudiante orientado a efectuar cálculos y estimaciones termodinámicas y cinéticas que permitan predecir el transcurso de las reacciones químicas de interés de tal forma que sean capaces de crear fuerzas o interrumpir circuitos para mover o detener un prototipo rodante. Las reacciones químicas se han de llevar a cabo de forma técnica y económicamente viable, ajustándose a un presupuesto, por lo que se incluirá material para estimarlo.

Objetivo 5: Ofrecer a los alumnos el material docente necesario, en base a la información recogida en la base de datos de reacciones químicas ampliada, para poder desarrollar un proyecto completo de selección de materiales que incluya consideraciones técnicas, medioambientales y económicas, que les permita seleccionar, en función de la reacción o reacciones elegidas para el diseño, los materiales más adecuados para cada uno de los componentes del prototipo que presentarán a competición en Chem-E-Car.

Objetivo 6: Ofrecer a los alumnos el material docente online de apoyo a la selección de materiales y el acceso a redes sociales profesionales y grupos de trabajo en el ámbito de la selección de materiales.

Objetivo 7: Guiar a los grupos de alumnos interesados en la elaboración de un diseño teórico de un prototipo, con su documentación completa, que cumpla los objetivos para participar en el concurso Chem-E-Car utilizando el material docente elaborado en este PIMCD y en el proyecto PIMCD 103 de 2014.

Objetivo 8: Fomentar una cultura de trabajo internacional y de colaboración entre el alumnado, facilitando contenidos en inglés y contactos en centros de trabajo extranjeros.

2. Objetivos alcanzados (Máximo 2 folios)

Con el material desarrollado en este Proyecto se han alcanzado los objetivos propuestos inicialmente:

Objetivo 1: Se preparó y celebró un seminario sobre el concurso Chem-E-Car y sobre el material desarrollado en el PIMCD 103 de 2014 en marzo de 2015 para informar a los alumnos del grado en Ingeniería Química y del grado en Ingeniería de los Materiales interesados en participar.

Objetivo 2: Se formaron dos equipos de trabajo multidisciplinarios con alumnos de distintos cursos de los grados de Ingeniería Química e Ingeniería de los Materiales. Cada equipo seleccionó un capitán y un tutor miembro del equipo del presente proyecto de innovación docente, para guiar a los alumnos. Los equipos de trabajo se muestran en el ANEXO 1.

Objetivo 3: Se amplió la base de datos de reacciones químicas, incorporando seis nuevos medios de control y frenado, mediante reacciones químicas seguras y que transcurren a temperatura ambiente o cercana a la misma y a presión atmosférica (ANEXO 2). Esto ha permitido concienciar a los estudiantes acerca del tipo de reacción a utilizar, de forma que éstos han escogido 4 de las reacciones presentes en la base de datos, para el diseño del Chem-E-Car.

Objetivo 4: Se ha generado una guía de cálculos de reacciones químicas, prácticas de cinética in vitro, plantillas de tratamiento de datos (cuaderno de laboratorio) y protocolos para el empleo de herramientas de cálculo, como material docente para el aprendizaje autodidacta del estudiante orientado a efectuar cálculos y estimaciones termodinámicas y cinéticas que le permitirán predecir el transcurso de las reacciones químicas de interés de tal forma que sean capaces de crear fuerzas o interrumpir circuitos para detener un prototipo rodante justo en el momento deseado. El material generado ayudará también a estimar el presupuesto asociado al empleo de cada reacción. Este material está recogido en los ANEXOS 3 y 4.

Objetivo 5: Se ha puesto a la disposición de los alumnos el paquete informático CES Edupack, que incluye bases de datos especializadas con más de 3900 materiales clasificados según diversos criterios y las herramientas necesarias para desarrollar proyectos de selección de materiales que incluye consideraciones tanto técnicas, como medioambientales y económicas.

Objetivo 6: Se crearon dos espacios virtuales a través de Moodle (UCM) para ofrecer a los alumnos:

- información general que incluye los materiales docentes generados en el PIMCD 103 de 2014 (ANEXO 5) así como enlaces directos a la página AIChE con información del concurso ChemECar, enlaces a buscadores de precios y otras páginas de interés para elaborar el presupuesto del prototipo.
- acceso a distintas herramientas y redes sociales profesionales, como por ejemplo, las enfocadas al ámbito de la selección de materiales (ANEXO 6).

Objetivo 7: Se ha tutorizado a los dos equipos mediante reuniones periódicas de los grupos con sus tutores en las que los alumnos expusieron los avances en el diseño y se resolvieron las dudas generadas. Así mismo, se les dio información detallada sobre los requisitos del concurso y sobre cómo emplear el material docente del que disponen elaborado en este PIMCD y en el proyecto PIMCD 103 de 2014. También se convocaron reuniones extraordinarias a petición de los alumnos y, contaron con la posibilidad de acudir a los diferentes profesores miembros del PIMCD para plantear dudas.

Objetivo 8: Se ha fomentado una cultura de trabajo internacional y de colaboración entre el alumnado, facilitando contenidos en inglés, como son artículos científicos, obtenidos a través de búsquedas tutorizadas en las bases de datos Scifinder Scholar y web of Science, material docente en inglés, como es la herramienta Edupack, y enlaces y contactos en centros de trabajo extranjeros puestos a disposición de los alumnos a través de uno de los campus virtuales, tal y como se describe en el desarrollo de las actividades. Asimismo, el trabajo continuado de los dos grupos constituidos por miembros de diversos cursos de los grados de Ingeniería Química y de Ingeniería de Materiales, ha favorecido la colaboración entre los alumnos de los distintos cursos, de forma que esta colaboración ya no se limita sólo al proyecto ChemECar, lo que es beneficioso no sólo para los alumnos de los primeros cursos, que reciben de sus compañeros de tercer curso una ayuda, sino también para estos últimos, que refuerzan sus dotes de transmisión de conocimiento gracias a esta colaboración.

3. Metodología empleada en el proyecto (Máximo 1 folio)

La consecución de los objetivos se ha llevado a cabo mediante las siguientes tareas:

Tarea 1. Preparación y celebración Seminario Chem-E-Car: Se preparó un seminario en marzo de 2015 para informar a los alumnos sobre el concurso Chem-E-Car y sobre el material desarrollado en el PIMCD 103 de 2014.

Tarea 2. Constitución de los equipos de trabajo y tutores: Una vez formados los grupos de trabajo, los equipos seleccionaron un capitán y eligieron tutor entre los profesores miembros del equipo del presente PIE, para guiar a los alumnos.

Tarea 3. Creación del Espacio Virtual e inclusión de material docente: Se crearon dos espacios virtuales en Moodle (UCM) con información general sobre el proyecto y material docente generado en el PIMCD 103 (2014) y acceso a distintas herramientas y redes sociales profesionales en el ámbito de la selección de materiales.

Tarea 4. Curso de seguridad: Para participar en la competición es necesario que todos los miembros de los equipos realicen el curso de seguridad SACHe.

Tarea 5. Ampliación base de datos de reacciones: Se han añadido seis reacciones de control y parada con cinéticas progresivas (enzimáticas) y de tipo reloj, para combinar con interruptores ópticos. Se completan así un número razonable de fichas, con reacciones de impulsión eléctrica o de formación de gases inocuos, y con reacciones de parada catalizadas y autocatalizadas.

Tarea 6. Elaboración de la guía metodológica de cálculos de las reacciones: Se ha elaborado una presentación con fundamentos de la ingeniería de la reacción química y 1 protocolo para el empleo de herramientas informáticas específicas (ASPEN).

Tarea 7. Elaboración de los guiones de prácticas de cinética “in-vitro”: Se han elaborado en cooperación con los alumnos participantes, una vez hubieron seleccionado las reacciones a estudiar. De esta forma se ha obtenido el máximo provecho de los mismos, ya que han servido como protocolos de experimentación.

Tarea 8. Creación de proyectos de selección de materiales: Se ha formado a los alumnos en el uso de EduPack para que puedan crear sus proyectos de materiales.

Tarea 9 y Tarea 10. Tutorización de los grupos. Reuniones periódicas con los alumnos: Se han celebrado reuniones periódicas de los grupos con sus tutores en las que los alumnos expusieron los avances en el diseño y se resolvieron las dudas generadas. Así mismo, se les dio información detallada sobre los requisitos del concurso y el material docente del que disponen. También se convocaron reuniones extraordinarias a petición de los alumnos y contaron con la posibilidad de acudir a los diferentes profesores miembros del PIMCD para plantear dudas.

Tarea 11. Supervisión del trabajo experimental de los grupos: Los alumnos participantes han tenido a su disposición los laboratorios y material del departamento de Ingeniería Química para realizar los experimentos necesarios y han sido supervisados en todo momento por miembros del equipo de investigación participantes en el proyecto.

4. Recursos humanos (Máximo 1 folio)

Durante el desarrollo del Proyecto han participado los profesores y los doctorandos de los tres grupos de investigación de la Facultad de Químicas, según se presentó en la propuesta: dos grupos de investigación del **departamento de Ingeniería Química** (sección de Química Industrial-Grupo de Celulosa y Papel y Grupo de Físico-Química de Procesos Industriales y Medioambientales) y el Grupo de Ingeniería de Superficies y Materiales Nanoestructurados del **departamento de Ciencias de los Materiales e Ingeniería Metalúrgica**.

El Grupo de Celulosa y Papel, formado por los siguientes miembros, además de llevar a cabo la coordinación del proyecto y tutorizar al equipo de trabajo 1, ha trabajado en las **Tareas 1, 2, 3 y 6**: C. Negro Álvarez (CU, Investigador responsable); A. Blanco Suárez (TU); E. de la Fuente González (TU); M.C. Monte Lara (PCD); R. Miranda Carreño (PCD); A. Tijero Cruz (PA); I. Latour Romero (Becaria FPU); C. Campano Tiedra (Becaria predoctoral de Proyecto del MINECO); N. Merayo Cuevas (Contrato con cargo a proyectos de investigación); L. Cortijo Garrido (Contrato con cargo a proyectos de investigación); H. Barndok (Contrato con cargo a proyectos de investigación); P. López Expósito (Contrato con cargo a proyectos de investigación); L. Blanco Jaén (Contrato con cargo a proyectos de investigación); A. Balea Martín (Contrato con cargo a proyectos de investigación) y J. Plaza Rodríguez (Técnico de laboratorio).

El Grupo de Físico-Química de Procesos Industriales y Medioambientales, formado por los siguientes miembros, ha trabajado en las **Tareas 5, 6 y 7** relacionadas con las reacciones químicas: F. García-Ochoa (CU); M. Ladero Gal (TU); S. Rodríguez Vega (PAD); M. Ravelo Velasquez (Doctorando); I. del Torre Pascual (Doctorando); D. Velasco Conde (Doctorando) y J.J. Senit Velasco (Doctorando).

El Grupo de Ingeniería de Superficies y Materiales Nanoestructurados, formado por los siguientes miembros, ha trabajado principalmente en las **Tareas 3 y 8**, relacionada con los materiales: F. J. Pérez Trujillo (CU); M.S. Mato Díaz (PAD); G. Alcalá Penadés (PAD); H. Santos Barahona (Becario FPI del MINECO); M.I. Lasanta Carrasco (Contrato con cargo a proyectos de investigación); T. de Miguel Gamio (Contrato con cargo a proyectos de investigación); G. García Martín (Contrato con cargo a proyectos de investigación); A. Illana Sánchez (Contrato con cargo a proyectos de investigación).

Los miembros del equipo investigador que no disponían de formación en Seguridad han realizado el curso "Formación básica en prevención de riesgos laborales" de la UCM (13/03/2015-10/07/2015), relacionado con la **Tarea 4**.

La supervisión del trabajo experimental de los equipos de trabajo ha sido llevada a cabo por:

- equipo de trabajo 1: la profesora E. de la Fuente y la investigadora N. Merayo con la ayuda del técnico de laboratorio J. Plaza
- equipo de trabajo 2: los profesores S. Rodríguez y M. Ladero con la ayuda de la técnico de laboratorio I. Erdocia.

5. Desarrollo de las actividades (Máximo 3 folios)

Preparación y celebración Seminario Chem-E-Car: Se preparó y celebró un seminario en marzo de 2015 para informar a los alumnos sobre el concurso Chem-E-Car y sobre el material desarrollado en el PIMCD 103 de 2014. Para ello, se convocó a alumnos de todos los cursos del grado en Ingeniería Química y del grado en Ingeniería de los Materiales interesados en participar en la competición. En esa primera reunión se les invitó a formar distintos equipos de trabajo multidisciplinares y a inscribirse en el capítulo español de estudiantes de AIChE, requisito para participar en la competición.

Constitución de los equipos de trabajo y tutores: Se formaron dos equipos de trabajo multidisciplinares (equipo 1, formado por 15 alumnos, y equipo 2, formado por 17 alumnos) con alumnos de todos los cursos de los dos grados que tuvieron que inscribirse en el capítulo español de estudiantes de AIChE, requisito para participar en la competición. Cada equipo seleccionó un capitán y un tutor miembro del equipo del presente proyecto de innovación docente, para guiar a los alumnos. El ANEXO 1 recoge la composición de cada grupo.

Creación del Espacio Virtual e inclusión de material docente: Se crearon dos espacios virtuales a través de Moodle (UCM):

- Uno, con información general que incluye los materiales docentes generados en el PIMCD 103 de 2014: Guía de Seguridad, Curso de Seguridad, Normativa de la C, Ejemplo de EDP, Guía metodológica para el diseño, información sobre reacciones de impulsión y frenado y otros enlaces de interés (ANEXO 5).
- Otro, a disposición de los alumnos de ingeniería de materiales, que ofrece el material docente necesario para aprender a utilizar el paquete informático CES Edupack, así como el acceso a redes sociales profesionales y grupos de trabajo en el ámbito de la selección de materiales. Este entorno de trabajo fomenta una cultura de trabajo colaborativa internacional entre el alumnado, facilita contenidos en inglés y contactos con centros de trabajo extranjeros. (ANEXO 6).

Curso de seguridad: Hasta el momento, 2 alumnos del equipo de trabajo 1 han realizado el curso de seguridad SAChe, de realización obligatoria para participar en la competición. Se insiste en cada reunión en que han de realizarlo todos y en que para ellos es gratuito. Está previsto que antes de la próxima competición lo realicen los demás alumnos participantes.

Así mismo, todos los miembros del equipo investigador han realizado el curso "Formación básica en prevención de riesgos laborales" de la UCM (13/03/2015-10/07/2015), salvo aquellos que ya disponen de la formación en Seguridad.

Ampliación base de datos de reacciones: La búsqueda bibliográfica comenzó en mayo y se ha centrado en la búsqueda de reacciones o sistemas reactivos de tipo biológico (catálisis enzimática y microbiana), con un éxito relativamente bajo, debido a la poca información publicada en este sentido, y en la búsqueda de reacciones tipo reloj con aumento o disminución de oscuridad en el medio líquido en el que suceden las reacciones. Se han empleado diversas bases de datos (ScienceDirect, Scopus,

Web of Science, Scifinder Scholar, espacenet, Google Scholar, Pubmed) y buscadores (Google, Yahoo), para encontrar varias fuentes bibliográficas que han ayudado a fijar seis reacciones de parada para operar con ellas. Como resultado se han elaborado seis nuevas fichas de reacciones que recogen la información esencial de cada sistema reactivo, así como referencias a artículos, guiones, y publicaciones varias de utilidad para completar la información (ANEXO 2).

Elaboración de la guía metodológica de cálculos de las reacciones: La guía metodológica de cálculos de reacciones (ANEXO 3) se ha elaborado en forma de presentación, para darle un carácter dinámico y que sirva de medio de consulta rápida a los estudiantes. Se han incluido cálculos estequiométricos, termodinámica de reacciones y obtención de modelos cinéticos, de forma tradicional y empleando herramientas informáticas de simulación como es el Aspen Custom Modeler, ya que, sobretudo esto último es esencial para poder predecir el accionamiento del interruptor de parada en las reacciones de tipo reloj. Se han incluido ejemplos resueltos para facilitar el seguimiento de los procedimientos de cálculo.

Elaboración de los guiones de prácticas de cinética “in-vitro”: Se han elaborado dos guiones de prácticas de cinética, y una plantilla que guía a los alumnos en la recopilación e interpretación de los resultados obtenidos, llamada “Cuaderno de laboratorio” (ANEXO 4). Para que estos guiones fuesen de la mayor utilidad posible, se han elaborado una vez conocidas las reacciones que los alumnos han seleccionado para el movimiento y la parada del prototipo y antes de que comenzaran el trabajo experimental en el laboratorio.

Creación de proyectos de selección de materiales: Al ser un trabajo que depende de trabajos previos, como son la selección de las reacciones que impulsarán y frenarán el prototipo, y debido a que estas etapas previas se han prolongado más de lo previsto no ha quedado tiempo material para desarrollar esta parte del trabajo, que será propuesto en la próxima convocatoria. Si bien los alumnos han empezado a manejarse con la herramienta Edupack y están listos para empezar a trabajar en proyectos de selección de materiales. Para más detalles de esta herramienta ver el enlace siguiente:

<https://www.grantadesign.com/download/pdf/CES-Edupack-2015-Overview.pdf>

Tutorización de los grupos. Reuniones periódicas con los alumnos: La tutorización de los grupos se ha llevado a cabo mediante reuniones periódicas de los grupos con sus tutores. Tras la primera reunión, se celebró una segunda reunión en la que se confirmaron los líderes de cada grupo y se expusieron los materiales docentes que tenían disponibles. Se les dio información detallada sobre los requisitos del concurso y sobre cómo emplear el material docente del que disponen y se profundizó sobre los requisitos de las reacciones a emplear. Entre el 6 y el 12 de Noviembre Carlos Negro acudió al concurso ChemECar que se celebró en Salt Lake City para recabar información sobre la competición y sobre los prototipos diseñados por otras universidades. En una cuarta reunión se supervisaron las reacciones de impulsión y parada seleccionadas por el grupo y se les instruyó sobre todas las normas de seguridad que han de contemplar en su trabajo experimental en el laboratorio y se dividió cada grupo en subgrupos que trabajan en las diferentes reacciones. Se planificó la experimentación a llevar a cabo en el laboratorio y se elaboraron los

guiones con los procedimientos experimentales a seguir, que se recogen en el (ANEXO 4). Las demás reuniones han tratado temas técnicos concretos del diseño o del trabajo experimental. En estas reuniones, con periodicidad quincenal, los alumnos expusieron los avances en el diseño y se resolvieron las dudas generadas.

Supervisión del trabajo experimental de los grupos: Los alumnos participantes han tenido a su disposición los laboratorios y material del departamento de Ingeniería Química para realizar los experimentos y han sido supervisados en todo momento por miembros del equipo de investigación, participantes en el proyecto, y por los técnicos de laboratorio. No obstante, material de laboratorio, como chapa de zinc o vasos y puntas Dexter, y reactivos específicos necesarios para llevar a cabo algunos experimentos, como sulfito de sodio, peróxido de hidrógeno, EDTA, almidón o ácido ascórbico, han sido financiados por el presente proyecto.

Los estudiantes se han distribuido en dos grupos, trabajando uno de ellos en los laboratorios que el departamento de Ingeniería Química de la UCM posee en la 5ª planta del edificio B, grupo 1, y los otros, grupo 2, en los laboratorios que dicho departamento tiene en la planta baja del edificio A de la Facultad de Ciencias Químicas. A su vez, se han dividido en grupos menores, bajo la dirección de los coordinadores de grupo (estudiantes de últimos cursos de grado) y la tutela de los profesores Carlos Negro, Miguel Ladero, Concepción Monte, Elena de la Fuente, Noemí Merayo, Sergio Rodríguez y Germán Alcalá.

Con el material de seguridad adecuado (batas, gafas, guantes), los alumnos han estudiado la diferencia de potencial real generada por las reacciones electroquímicas seleccionadas y han comenzado a optimizar el diseño de la pila. En cuanto a las reacciones de control y parada, se han obtenido cinéticas siguiendo el protocolo descrito en las prácticas de cinética in vitro preparadas, mediante la observación de la evolución de color a simple vista, primero y de forma más precisa (en espectrofotómetro) después. Además, los alumnos han recibido un seminario de cinética química en el que se les ha explicado la utilización del Aspen Custom Modeler para llegar a modelos cinéticos aplicables en las condiciones de concurso cuando se emplean reacciones complejas.

Además, se está trabajando en colaboración con los servicios de asistencia a la investigación de la universidad, en concreto con el taller mecánico y con el taller de electrónica, y con la ayuda de diversos técnicos de la Facultad de Ciencias Físicas para diseñar las células electroquímicas y el interruptor óptico del prototipo. De esta forma se fomenta el conocimiento por parte de los alumnos de estos servicios, y se complementa la formación de los alumnos en electrónica, mecánica y programación (están elaborando con ayuda de técnicos de física y del taller de electrónica un programa para el manejo del robot Arduino que controle el interruptor óptico).

Los resultados obtenidos hasta el momento por ambos equipos se adjuntan en los ANEXOS 7 y 8.

Elaboración del informe final: Para la elaboración del informe final se han celebrado reuniones con los diferentes miembros del proyecto y se ha recogido e integrado la información aportada por cada uno. Posteriormente se ha enviado copia a todos los miembros, que han revisado el documento antes de su aprobación.

6. Anexos

ANEXO 1. COMPOSICIÓN DE LOS EQUIPOS DE TRABAJO

ANEXO 2. AMPLIACIÓN DE BASES DE DATOS

ANEXO 3. GUÍA METODOLÓGICA DE CÁLCULO DE REACCIONES

ANEXO 4. GUIONES DE PRÁCTICAS

ANEXO 5. ESPACIO VIRTUAL CON INFORMACIÓN GENERAL

ANEXO 6. ESPACIO VIRTUAL DE MATERIALES

ANEXO 7. RESULTADOS DEL EQUIPO DE TRABAJO 1

ANEXO 8. RESULTADOS DEL EQUIPO DE TRABAJO 2

ANEXO 1

COMPOSICIÓN DE LOS EQUIPOS DE TRABAJO

ANEXO 1. COMPOSICIÓN DE LOS EQUIPOS DE TRABAJO

EQUIPO DE TRABAJO 1:

Tutoras: Elena de la Fuente González y Noemí Merayo Cuevas

Nombre	Grado	Curso 2014/2015	e-mail
Raúl Alberola Sánchez	Ingeniería Química	2	raulalbe@ucm.es
Pablo Ara Jimeno	Ingeniería Química	1	pabloars@ucm.es
Pablo Arsuaga Cao	Ingeniería Química	1	pabara@ucm.es
Alberto Ávila Palomares	Ingeniería Química	3	albertoavila@ucm.es
Pilar Bolívar Tejedo	Ingeniería Química	2	pbolivar@ucm.es
Maurizio Antonio Carlucci (Capitán)	Ingeniería Química	2	mcarlucc@ucm.es
Pablo del Amo Salgado	Ingeniería Química	2	pdelamo@ucm.es
Lucía Espinosa	Ingeniería Química	2	luciaesp@ucm.es
Gemma Fernández Rodríguez	Ingeniería Química	2	gemmafer@ucm.es
Alicia Galán Galán	Ingeniería Química	2	aligal01@ucm.es
Alejandro Márquez Negro	Ingeniería Química	2	alejmarq@ucm.es
Diego Martín Jiménez	Ingeniería Química	2	dimart04@ucm.es
Lorena Morona Murillo	Ingeniería Química	3	lmorona@ucm.es
Antonio Pedregal Sáez	Ingeniería Química	1	antonped@ucm.es
Jesús Resino Guitao	Ingeniería Química	3	jresino@ucm.es

EQUIPO DE TRABAJO 2:**Tutor: Sergio Rodríguez Vega y Miguel Ladero Galán**

Nombre	Grado	Curso 2014/2015	e-mail
Itziar Arias Escanciano	Ingeniería Química	2	itziaria@ucm.es
Héctor Arriba Gutiérrez	Ingeniería de Materiales	2	hectorar@ucm.es
Marco Barrio de Santa Ana	Ingeniería Química	2	marcbarr@ucm.es
Roberto Bustos Pariente	Ingeniería Química	3	roberbus@ucm.es
Alejandro Carrero Roldán	Ingeniería Química	2	acarre02@ucm.es
Maria Fernandez Novo	Ingeniería Química	1	marfer29ucm.es
Jose Carlos García Escribano	Ingeniería Química	2	josecg03@ucm.es
Patricia García Fernández	Ingeniería Química	1	patgar12@ucm.es
Juan García Martínez	Ingeniería Química	2	juanga09@ucm.es
Noelia Herranz López	Ingeniería Química	1	noeherra@ucm.es
Cynthia Hopson	Ingeniería Química	2	chopson@ucm.es
Juan Carlos Jiménez Hernanz	Ingeniería Química	2	Juancjim@ucm.es
Blanca Malavé Álvarez	Ingeniería Química	3	bmalave@ucm.es
Miguel Mas Jiménez (Capitán)	Ingeniería Química	3	migmas@estumail.ucm.es
Jorge Navarro Torres	Ingeniería de Materiales	3	jornav01@ucm.es
Francisco J. Pinto Villanueva	Ingeniería Química	3	fpinto@ucm.es
Raquel Sanabria Martín	Ingeniería Química	3	raqusana@estumail.ucm.es

ANEXO 2

AMPLIACIÓN DE BASES DE DATOS

ANEXO 2. AMPLIACIÓN DE BASES DE DATOS

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL IMPEDIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

RELOJ DE FORMALDEHIDO

Reacción 1: $\text{HCHO (ac)} + \text{SO}_3^{2-} \text{ (ac)} \leftrightarrow \text{OCH}_2\text{SO}_3^- \text{ (ac)}$

Reacción 2: $\text{OCH}_2\text{SO}_3^- \text{ (ac)} + \text{H}^+ \text{ (ac)} \leftrightarrow \text{HOCH}_2\text{SO}_3^- \text{ (ac)}$

Reacción 3: $\text{H}_2\text{O} + \text{HCHO} + \text{SO}_3^{2-} \text{ (ac)} \leftrightarrow \text{HOCH}_2\text{SO}_3^- \text{ (ac)} + \text{OH}^- \text{ (ac)}$

Reacción 4: $\text{HSO}_3^- \text{ (ac)} + \text{OH}^- \text{ (ac)} \leftrightarrow \text{SO}_3^{2-} \text{ (ac)} + \text{H}_2\text{O}$

MATERIALES

Reactivos: Bisulfito sódico, formaldehído, sulfato de sodio anhidro

Indicadores: fenoftaleína, timoftaleína, p-nitrofenol (para cambiar el color al cambiar el pH)

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

La Reacción 4 es un equilibrio ácido-base en una sola fase, un fenómeno muy rápido. En tanto en cuanto existe bisulfito, el pH global es ácido, pero, si desaparece, se acumulan los iones hidroxilo rápidamente y el pH pasa a básico.

Las reacciones 1 a 3 son muy lentas, o lo es la 3, al menos, lo que permite controlar la velocidad global del proceso con esta reacción.

Notas: Esta reacción podría utilizarse junto con un foto-sensor para la parada del coche una vez que el color oscuro correspondiente a pH básico sea detectado. El tiempo en el que aparece el complejo coloreado puede controlarse cambiando las condiciones en las que la reacción tiene lugar.

Bibliografía:

Brown, Kathryn Helen (1999) *Kinetic studies on the reaction of formaldehyde with amines in the presence of sulfite*. Doctoral thesis, Durham University.

Repositorio Tesis Universidad Durham: <http://etheses.dur.ac.uk/4972/>

Barrett, R. L. (1955) The formaldehyde clock reaction. J. Chem. Educ., 1955, 32 (2), p 78

DOI: 10.1021/ed032p78.

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL PERMITIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

RELOJ DE YODO-PERCLÓRICO



MATERIALES

Reactivos: Bisulfito sódico, yodo resublimado, yoduro de potasio, clorato sódico y ácido perclórico

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

El color azul oscuro, casi negro, desaparece entre 30 y 300 segundos en función de las concentraciones de los distintos reactivos. Aumentar las concentraciones de las soluciones de clorato y de ácido supone reducir el periodo de inducción, mientras que la concentración inicial de yodo no afecta al tiempo de inducción.

Esta red de reacciones y sus variantes, al revés que las reacciones clásicas de yodo, obliga a programar el robot de desconexión del circuito eléctrico en el ChemECar de tal forma que se desconecte al percibir el fotodetector la luz, ya que comienza el proceso con un líquido muy oscuro.

Bibliografía:

Oliveira, A.P., Faria, R.B. The Chlorate-Iodine Clock Reaction. *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, 127 (51), pp 18022–18023

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL PERMITIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

RELOJ DE OZONO-YODO-PERCLÓRICO: REACCIONES Y MECANISMO

Reaction	Rate law ^b
$I_2 + H_2O \leftrightarrow HOI + I^- + H^+$	$1.98 \times 10^{-3} [I_2]/[H^+] - 3.67 \times 10^8 [HOI][I^-]$
$I_2 + H_2O \leftrightarrow H_2IO^+ + I^-$	$5.52 \times 10^{-2} [I_2] - 3.48 \times 10^9 [H_2IO^+][I^-]$
$HClO_2 + I^- + H^+ \rightarrow HOI + HOCl$	$7.8 [HClO_2][I^-]$
$HClO_2 + HOI \rightarrow HIO_2 + HOCl$	$6.9 \times 10^7 [HClO_2][HOI][H^+]$
$HClO_2 + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HOCl + H^+$	$1.0 \times 10^6 [HClO_2][HIO_2]$
$HOCl + I^- \rightarrow HOI + Cl^-$	$4.3 \times 10^8 [HOCl][I^-]$
$HOCl + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + Cl^- + 2 H^+$	$1.5 \times 10^3 [HOCl][HIO_2]$
$HIO_2 + I^- + H^+ \leftrightarrow 2 HOI$	$1 \times 10^9 [HIO_2][I^-][H^+] - 22 [HOI]^2$
$2 HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HOI + H^+$	$25 [HIO_2]^2$
$HIO_2 + H_2IO^+ \rightarrow IO_3^- + I^- + 3 H^+$	$110 [HIO_2][H_2IO^+]$
$HOCl + Cl^- + H^+ \leftrightarrow Cl_2 + H_2O$	$2.2 \times 10^4 [Cl_2][H^+] - 22 [HOCl][Cl^-]$
$Cl_2 + I_2 + 2 H_2O \rightarrow 2 HOI + 2 Cl^- + 2 H^+$	$1.5 \times 10^5 [Cl_2][I_2]$
$Cl_2 + HOI + H_2O \rightarrow HIO_2 + 2 Cl^- + 2 H^+$	$1.0 \times 10^6 [Cl_2][HOI]$
$HClO_2 \leftrightarrow ClO_2^- + H^+$	$2 \times 10^8 [HClO_2] - 1 \times 10^{10} [ClO_2^-][H^+]$
$HOI + H^+ \leftrightarrow H_2OI^+$	$1 \times 10^{10} [HOI][H^+] - 3.4 \times 10^8 [H_2OI^+]$
$I_2 + I^- \leftrightarrow I_3^-$	$5.52 \times 10^9 [I_2][I^-] - 7.5 \times 10^6 [I_3^-]$
$O_3 + I^- + H^+ \rightarrow HOI + O_2$	$1.2 \times 10^9 [O_3][I^-][H^+]$
$ClO_3^- + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HClO_2$	$20 [ClO_3^-][HIO_2][H^+]$
$ClO_3^- + H_2IO^+ + H^+ \rightarrow HIO_2 + HClO_2 + H^+$	$1.4 [ClO_3^-][H_2IO^+][H^+]$

MATERIALES

Reactivos: ozono (de generador), ácido perclórico, yodo resublimado

El ozono se obtiene en un generador de ozono con oxígeno de alta pureza y se burbujea en una solución de ácido perclórico 0.6 M para reducir su velocidad de descomposición. El yodo se puede resublimar para mayor pureza. Todas las soluciones se hacen en agua grado reactivo 1, con una resistividad de 18 MΩ. La reacción de decoloración se sigue por espectrofotometría a $\lambda = 460$ nm.

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica.

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

La solución de yodo se puede irradiar con luz UV para reducir el tiempo de inducción. Mayor tiempo de irradiación implica menor tiempo de inducción. El ajuste de las concentraciones permite ajustar los tiempos entre 25 y 300 segundos (lo que, por ejemplo, es ideal para concursos tipo ChemECar, con tiempos de ejecución de la prueba no superiores a 2 minutos)

Notas: Esta reacción podría utilizarse junto con un foto-sensor para la parada del coche una vez que el color claro final se detecte. Sin embargo, el robot debe programarse al revés: que desconecte el circuito al percibir luz, ya que comienza funcionando en la oscuridad.

Bibliografía:

Sant'Anna, R.T.P., Monteiro, E.V., Pereira, J.R.T., Faria, R.B. The Ozone-Chlorate-Iodine Clock Reaction. PLoS ONE 8(12): e83706. doi:10.1371/journal.pone.0083706

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL PERMITIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

RELOJ DE ÁCIDO NÍTRICO-YODO-PERCLÓRICO: REACCIONES Y MECANISMO

Reaction	Rate law ^b
$I_2 + H_2O \leftrightarrow HOI + I^- + H^+$	$1.98 \times 10^{-3} [I_2]/[H^+] - 3.67 \times 10^9 [HOI][I^-]$
$I_2 + H_2O \leftrightarrow H_2OI^+ + I^-$	$5.52 \times 10^{-2} [I_2] - 3.48 \times 10^9 [H_2OI^+][I^-]$
$HClO_2 + I^- + H^+ \rightarrow HOI + HOCl$	$7.8 [HClO_2][I^-]$
$HClO_2 + HOI \rightarrow HIO_2 + HOCl$	$6.9 \times 10^7 [HClO_2][HOI][H^+]$
$HClO_2 + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HOCl + H^+$	$1.0 \times 10^6 [HClO_2][HIO_2]$
$HOCl + I^- \rightarrow HOI + Cl^-$	$4.3 \times 10^8 [HOCl][I^-]$
$HOCl + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + Cl^- + 2 H^+$	$1.5 \times 10^3 [HOCl][HIO_2]$
$HIO_2 + I^- + H^+ \leftrightarrow 2 HOI$	$1 \times 10^9 [HIO_2][I^-][H^+] - 22 [HOI]^2$
$2 HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HOI + H^+$	$25 [HIO_2]^2$
$HIO_2 + H_2OI^+ \rightarrow IO_3^- + I^- + 3 H^+$	$110 [HIO_2][H_2OI^+]$
$Cl_2 + H_2O \leftrightarrow HOCl + Cl^- + H^+$	$22 [Cl_2] - 2.2 \times 10^4 [HOCl][Cl^-][H^+]$
$Cl_2 + I_2 + 2 H_2O \rightarrow 2 HOI + 2 Cl^- + 2 H^+$	$1.5 \times 10^5 [Cl_2][I_2]$
$Cl_2 + HOI + H_2O \rightarrow HIO_2 + 2 Cl^- + 2 H^+$	$1.0 \times 10^6 [Cl_2][HOI]$
$HClO_2 \leftrightarrow ClO_2^- + H^+$	$2 \times 10^8 [HClO_2] - 1 \times 10^{10} [ClO_2^-][H^+]$
$HOI + H^+ \leftrightarrow H_2OI^+$	$1 \times 10^{10} [HOI][H^+] - 3.4 \times 10^8 [H_2OI^+]$
$I_2 + I^- \leftrightarrow I_3^-$	$5.6 \times 10^9 [I_2][I^-] - 7.5 \times 10^6 [I_3^-]$
$ClO_3^- + HNO_2 \rightarrow ClO_2^- + NO_3^- + H^+$	$1.8 \times 10^{-2} [ClO_3^-][HNO_2][H^+]^2$
$ClO_3^- + HIO_2 \rightarrow IO_3^- + HClO_2$	$20 [ClO_3^-][HIO_2][H^+]$

MATERIALES

Reactivos: clorato de sodio, ácido perclórico, yodo resublimado, nitrito sódico

El yodo se puede resublimar para mayor pureza. Todas las soluciones se hacen en agua grado reactivo 1, con una resistividad de 18 MΩ. La reacción de decoloración se sigue por espectrofotometría a $\lambda = 460$ nm usando una cubeta termostatzada. Las concentraciones de las soluciones de yodo y de ácido nítrico se ajustan mediante calibrados a longitudes de onda de 460 y 358 nm, respectivamente.

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica.

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

El ajuste de las concentraciones permite ajustar los tiempos entre 25 y 300 segundos (lo que, por ejemplo, es ideal para concursos tipo ChemECar, con tiempos de ejecución de la prueba no superiores a 2 minutos). En cualquier caso, concentraciones de ácido nítrico mayores de 0.001 M implican tiempos de inducción muy cortos. La solución de clorato también se ha de ajustar en cuanto a su concentración, pues pasa lo mismo.

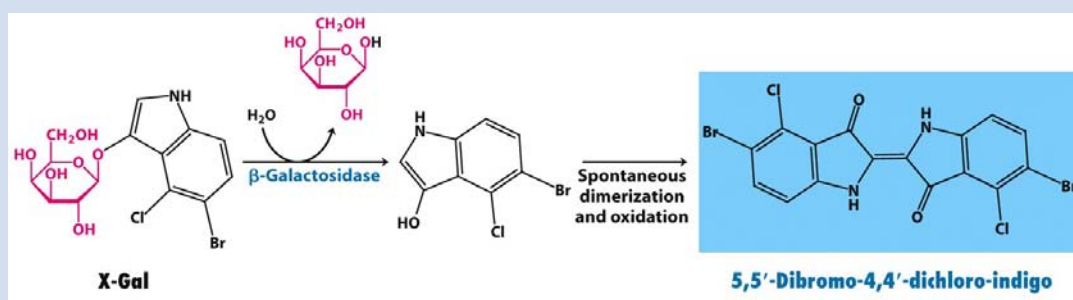
Notas: Esta reacción podría utilizarse junto con un foto-sensor para la parada del coche una vez que el color claro final se detecte. Sin embargo, el robot debe programarse al revés: que desconecte el circuito al percibir luz, ya que comienza funcionando en la oscuridad.

Bibliografía:

Sant'Anna, R.T.P., Monteiro, E.V., Pereira, J.R.T., Faria, R.B. The Ozone-Chlorate-Iodine Clock Reaction. PLoS ONE 8(12): e83706. doi:10.1371/journal.pone.0083706

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL IMPEDIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DE 5-BROMO-4-CLORO-3-INDOLIL-B-D-GALACTOPIRANÓSIDO (X-gal)



MATERIALES

Tampón Na_2HPO_3/NaH_2PO_3 50 mM pH 7,2 como medio de reacción. En él se disuelve el X-gal a una concentración de 20 mg/L a partir de 20 g/L (solución madre, en DMSO)
Fuente de β -galactosidasa: enzima adsorbida en carbón activo o diluida en el tampón (por ejemplo, Lactozym 6500 HG, de Novozymes).

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)
Presión atmosférica

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

Reacción irreversible por el gran exceso de agua. Se obtiene un producto particularizado, sólido, azul muy oscuro

Muy utilizada para detección de clones que portan el operón *lac*, ya que el producto índigo marca claramente que colonias tienen los plásmidos.

Cinética muy dependiente de la temperatura (máxima a 30-35 °C), el pH (máxima a pH neutro) y proporcional a la concentración de enzima. El color azul oscuro que se produce bloquea el paso de la luz, lo que permite al robot Arduino provocar el corte de suministro eléctrico en el ChemECar.

Bibliografía:

Heuermann, K., Cosgrove, J. S-Gal: An Autoclavable Dye for Color Selection of Cloned DNA Inserts". Biotechniques (2001) 30: 1142–1147.

URL: http://www.biotechniques.com/multimedia/archive/00011/01305pf01_11053a.pdf

Un material ya preparado para la práctica (y la detección de clones):

<http://www.genlantis.com/x-gal-staining-kit.html>

Una casa comercial (datos, precios y características del producto):

<http://www.melford.co.uk/index.php?t=details&sid=\&&id=200>

REACCIÓN DE PARADA: ACCIONA UN INTERRUPTOR ÓPTICO AL IMPEDIR LA LLEGADA DE LUZ DE UN LED A UN FOTODETECTOR

RELOJ DE YODO CON Vitamina C ($C_6H_8O_6$)

Reacción 1 (Lenta). $2H^+(aq) + 2I^-(aq) + 2H_2O_2(aq) \rightarrow I_2(aq) + 2H_2O(l)$

Reacción 2 (rápida): $I_2(aq) + C_6H_8O_6(aq) \rightarrow 2H^+(aq) + 2I^-(aq) + C_6H_6O_6(aq)$

Reacción 3 (rápida): $I_2 + \text{almidón} \rightarrow \text{almidón-}I_2$ (azul-negro)

MATERIALES

Reactivos: Yoduro potásico (KI), Peróxido de hidrógeno (H_2O_2), ácido ascórbico y almidón

CONDICIONES DE OPERACIÓN

Temperatura ambiente (20-30 °C)

Presión atmosférica

INFORMACIÓN TERMODINÁMICA Y CINÉTICA

La Reacción 1 es la etapa controlante y determina la velocidad del proceso. sin embargo, el ácido ascórbico es el reactivo limitante y la reacción 3 no se dará hasta que no se consuma este reactivo..

La Reacción 2 es muy rápida y compite con la reacción 3 de forma que impide la aparición del complejo almidón-yodo de color azul.

El tiempo en el que la disolución cambia de incolora anegada depende de varios factores:

- Concentración inicial de yoduro y de peróxido (la producción de yodo en la reacción 1 será más rápida cuanto mayores sean dichas concentraciones)
- Concentración de ácido ascórbico, ya que ha de consumirse en la reacción 2 antes de que se produzca la reacción 3.
- Temperatura. La velocidad global del proceso aumenta con la temperatura al hacerlo la constante cinética de la reacción 1.

Notas: Esta reacción podría utilizarse junto con un foto-sensor para la parada del coche una vez que el color azul sea detectado.

El tiempo en el que aparece el complejo coloreado puede controlarse cambiando las condiciones en las que la reacción tiene lugar.

Se puede emplear vitamina C de farmacia, pero habrá que tener en cuenta la composición de la misma, ya que puede contener almidón u otros excipientes que alteren el proceso y, habrá que calcular la concentración real de ácido ascórbico que se emplea.



Bibliografía:

C. D. Torres, M. L. A. Muñoz. Reacciones encadenadas: del reloj de yodo al arco iris químico. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* (2011) 8 (1), 105-110.

M^a L. Aguilar Muñoz, C. Durán Torres. Química recreativa con agua oxigenada. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*, 8 (Núm. Extraordinario), 446-453, 2011

ANEXO 3

GUÍA METODOLÓGICA DE CÁLCULO DE REACCIONES




GUÍA METODOLÓGICA PARA LA ELABORACIÓN DE CÁLCULOS DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

Esta guía consta de dos partes:


- 1. Ingeniería de la reacción química**
- 2. Guía de cálculo para el empleo de herramientas informáticas para la realización de cálculos de las reacciones químicas**

Guía de cálculos de reacciones químicas 1



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Guía de cálculos de reacciones químicas 2



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA


- **Conceptos básicos**
 - Termodinámica y cinética
 - Clasificación de las reacciones químicas.
 - Leyes de conservación de materia y energía
 - Estequiometría de la reacción química
- **Termodinámica**
- **Cinética**
 - Modelos cinéticos
 - Ejemplos
- **Bibliografía**

Guía de cálculos de reacciones químicas 3




1. CONCEPTOS BÁSICOS

Guía de cálculos de reacciones químicas 4



UCM
INGENIERÍA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN



Cinética:

- Predice la velocidad con la que evoluciona el sistema hacia el equilibrio
- Influencia de T^a , concentraciones, presión

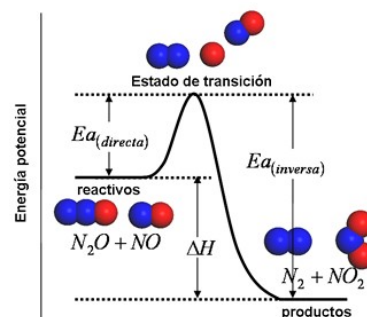
↓

- Ecuación cinética

Termodinámica:

- Predice cuál será el estado de equilibrio final (concentraciones de cada especie) y los estados de equilibrio intermedios.
- Predice si una reacción es espontánea o no y la conversión máxima alcanzable según las condiciones de reacción (T^a , P).
- Predice la energía consumida o generada en la reacción

Guía de cálculos de reacciones químicas **5**





UCM
INGENIERÍA QUÍMICA

CLASIFICACIÓN DE REACCIONES QUÍMICAS



Según el número de fases:

- Homogéneas
- Heterogéneas
 - Gas-líquido: difusión del reactivo gaseoso en el líquido
 - Gas-sólido: reactivo sólido y uno o más productos o reactivos gaseosos
 - Líquido-líquido: dos fases líquidas inmiscibles (nitración benceno)
 - Líquido-sólido: Ej. Disolución de metales en ácidos.
 - Sólido-sólido: diseño empírico y complejo del reactor. Ej. Altos hornos (sólido-sólido-gas).

Homogéneas que han de considerarse como heterogéneas desde el punto de vista cinético: reacciones tan rápidas que la velocidad está limitada por la transferencia de materia y la transferencia de calor.

Reacciones catalíticas:

- Catálisis homogénea: catalizador disuelto en el medio de reacción
- Catálisis heterogénea: necesaria la difusión de los reactivos y productos hasta la superficie y los centros activos del catalizador. Ej. Cat. sólidos.

Guía de cálculos de reacciones químicas **6**

CLASIFICACIÓN DE REACCIONES QUÍMICAS		
Ejemplos		
	No catalizadas	Catalizadas
Homogéneas	La mayor parte de las reacciones en fase gaseosa	La mayor parte de las reacciones en fase líquida
Heterogéneas	Combustión de carbón	Síntesis de amoníaco
	Tostación de minerales	Oxidación de amoníaco para dar ácido nítrico
	Ataque de sólidos por ácidos	Cracking del petróleo
	Absorción gas-líquido con reacción	Oxidación de SO_2 a SO_3

Guía de cálculos de reacciones químicas 7

LEYES DE CONSERVACIÓN DE MATERIA Y ENERGÍA

Ley de Conservación de la Materia

“En una reacción química, la materia ni se crea ni se destruye, sólo se transforma” (Lavoisier, 1789)

Excepción: Reacciones nucleares

Cuando se aplica a un sistema determinado la ecuación se conoce como

BALANCE DE MATERIA

Ley de Conservación de la Energía (Primer principio de la Termodinámica)


“La energía no puede crearse ni destruirse, sólo puede cambiar de una forma a otra, por ejemplo, de energía eléctrica a energía calorífica” (Sadi Carnot, 1824)

Cuando se aplica a un sistema determinado la ecuación se conoce como


BALANCE DE ENERGÍA o BALANCE ENTÁLPICO




Guía de cálculos de reacciones químicas 8



BALANCE DE MATERIA ESTEQUIOMETRÍA



Ecuación general de conservación

En régimen estacionario:

La masa total de todas las corrientes de **ENTRADA** en un determinado recinto ha de ser igual a la masa total de la suma de las corrientes de **SALIDA**.

ENTRADA = SALIDA

En régimen no estacionario y reacción química:


Se incorporan dos términos: la acumulación de la materia en el recinto y la generación de materia debida a la reacción química (aparición o desaparición)

ENTRADA + GENERACIÓN = SALIDA + ACUMULACIÓN


↓


BALANCE DE MATERIA GENERAL
Referido a la unidad de tiempo

Guía de cálculos de reacciones químicas **9**



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



$$\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l})$$


$$2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$$


coeficientes estequiométricos

Cada molécula de O_2 reacciona con dos moléculas de H_2

Guía de cálculos de reacciones químicas **10**



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Interpretación microscópica de los coeficientes estequiométricos


- Las moléculas de reactivos reaccionan entre sí, en la proporción indicada por los coeficientes estequiométricos
- La proporción de moléculas de productos generadas a partir de moléculas de reactivos también es la indicada por los coeficientes estequiométricos
- Sólo se indica el resultado global de la reacción
 - Si la reacción tiene lugar en varios pasos (mecanismo de la reacción), las moléculas que se generan temporalmente para ser consumidos inmediatamente (intermedios de reacción) no se indican

$$2\text{H}_2 (g) + \text{O}_2 (g) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(l)$$


Cada molécula de O_2 reacciona con dos moléculas de H_2 para formar dos moléculas de agua

Guía de cálculos de reacciones químicas

11



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Interpretación macroscópica de los coeficientes estequiométricos


- Un mol de una sustancia cualesquiera contiene siempre el mismo número (N_A) de moléculas de sustancia –por definición de mol–
- $N_A = n^\circ$ de Avogadro = $6,0221418 \times 10^{23}$ moléculas/mol
- Los moles de cada reactivo que reaccionan entre sí guardan la misma proporción que los coeficientes estequiométricos
- Los moles de productos que se generan a partir de los reactivos guardan la misma proporción que los coeficientes estequiométricos

$$2\text{H}_2 (g) + \text{O}_2 (g) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(l)$$


Cada mol de O_2 reacciona con dos moles de H_2 para formar dos moles de agua
 Cada 32 g de O_2 reacciona con 4 g ($2 \times 2 = 4$) de H_2 para formar 36 g de agua

Guía de cálculos de reacciones químicas

12



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Cálculos estequiométricos

- **Ejemplo 1: Cálculo de reactivos y productos**
 - ¿Con cuántos gramos de H₂ reaccionan 38,4 g de O₂?
 - ¿Cuántos gramos de H₂O producen?


$$2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$$

$$38,4 \text{ g O}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol O}_2}{32,00 \text{ g O}_2} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2}{1 \text{ mol O}_2} \cdot \frac{2,016 \text{ g H}_2}{1 \text{ mol H}_2} = 4,84 \text{ g H}_2$$


$$38,4 \text{ g O}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol O}_2}{32,00 \text{ g O}_2} \cdot \frac{2 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol O}_2} \cdot \frac{18,02 \text{ g H}_2\text{O}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}} = 43,2 \text{ g H}_2\text{O}$$

- Cuando se prepara una mezcla de reactivos de modo que los moles de los mismos guardan la misma proporción que los coeficientes estequiométricos, se dice que es una **mezcla estequiométrica**, o que los reactivos están en **proporciones estequiométricas**

Guía de cálculos de reacciones químicas 13



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Cálculos estequiométricos

- **Ejemplo 2: Reactivo limitante (reactivo en defecto)**
 - En un recipiente cerrado se prepara una mezcla de 2,4 mol de O₂ y 4 mol de H₂, se inicia la reacción con una chispa.

$$2\text{H}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$$
 - ¿Cuántos moles de O₂ reaccionan?
 - 2,40 mol O₂ podrían reaccionar con 4,80 mol H₂, pero sólo hay presentes 4,00 mol H₂; luego se quedará O₂ sobrante sin reaccionar. Solo reaccionan 2 moles de O₂, quedando 0,4 moles sin reaccionar
 - ¿Cuántos moles de H₂ reaccionan? ¿cuál es el reactivo limitante?
 - El H₂ está en defecto, es pues el reactivo limitante por lo que, reaccionaría todo el H₂, es decir, 2 moles.
- Cuando los reactivos no están en proporciones estequiométricas, Los cálculos han de llevarse a cabo partiendo del reactivo limitante

Guía de cálculos de reacciones químicas 14



ESTEQUIOMETRIA DE LA REACCIÓN QUÍMICA



Conversión:

- Grado de progreso de una reacción química
- Cociente entre el número de moles de reactivo convertidos y el número de moles iniciales

$$\chi = \frac{\text{Reactivo consumido}}{\text{Reactivo en la alimentación}}$$

Selectividad:

- Fracción del reactivo convertido que se ha transformado en un producto determinado
- Cociente entre los moles de reaccionante que han sido transformados en el producto de interés y los moles totales de reactivo convertidos.

$$S = \frac{\text{Producto deseado producido}}{\text{Reactivo consumido}} \left(\begin{array}{l} \text{relación} \\ \text{estequiom.} \end{array} \right)$$

Rendimiento:

$$\xi = \frac{\text{Producto deseado producido}}{\text{Reactivo en la alimentación}} \left(\begin{array}{l} \text{relación} \\ \text{estequiom.} \end{array} \right)$$


- Rendimiento= Conversión x selectividad

Guía de cálculos de reacciones químicas 15





2. TERMODINÁMICA

Guía de cálculos de reacciones químicas 16



BALANCES DE ENERGÍA



¿Qué es la ENERGÍA?


Capacidad para producir trabajo.

Magnitudes y Unidades


- **Cantidad absoluta:** Energía, J, cal, kcal, kJ
- **Caudal:** Energía/tiempo, J/s (W)
- **Flujo:** Energía/(tiempo.superficies), W/m²
- **Específica:** Energía/masa, J/kg

Guía de cálculos de reacciones químicas

17



BALANCES DE ENERGÍA



ENERGÍA.

Formas de energía:


- Radiación electromagnética, (flujo de fotones)
- Energía Eléctrica, (flujo de partículas cargadas)
- Energía Potencial, (posición)
- Energía Cinética, (velocidad)
- Energía Química (de enlace),

Transferencia de energía, energías en tránsito:


- Calor, Q,
 - Energía en tránsito de un cuerpo que se haya a una temperatura hacia otro que está a menor temperatura con el fin de igualar ambas
- Trabajo, W,
 - energía en tránsito debido a la acción de una fuerza mecánica.

Guía de cálculos de reacciones químicas

18



BALANCES DE ENERGÍA



Formas de energía:

- **Radiación electromagnética,**


$$E = h \nu$$

h = Constante de Plank = Energía
 ν = Frecuencia de la onda (s^{-1})
- **Energía Potencial, (campo gravitatorio)**
 m = masa (g)
 g = aceleración de la gravedad $\approx 9.8 \text{ m/s}^2$
 h = altura (m)


$$E_p = m g h$$
- **Energía Cinética,**
 v = velocidad (m/s)
- **Energía Nuclear (E_n):**
 - Transformación de masa en energía. $E_n = mc^2$
Desintegraciones nucleares

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2$$
 - c = velocidad de la luz (m/s)

Guía de cálculos de reacciones químicas 19



BALANCES DE ENERGÍA




**LA ENERGÍA NI SE CREA NI SE
DESTRUYE,
SÓLO SE TRANSFORMA.**

1ª Ley de la Termodinámica
$$\oint_c dQ - \oint_c dW = 0$$


Energía interna, U,
$$dU = dQ - dW$$

- diferencia entre el calor y el trabajo que entra o sale del sistema

Guía de cálculos de reacciones químicas 20



BALANCES DE ENERGÍA



Energía interna, U ,

- Variable termodinámica (Función de estado)
- Energía debida al movimiento de las moléculas con respecto al centro de masas del sistema, al movimiento de rotación y vibración, a las interacciones electromagnéticas de las moléculas y al movimiento e interacciones de los constituyentes atómicos de las moléculas.
- Su valor se fija respecto a una referencia.
- Está relacionada con otras variables termodinámicas:
 - Energía Libre de Gibbs (G),
 - Entropía (S),
 - Entalpía (H).


$$H = U + PV$$

$$U = H - PV$$


$$dU = dH - PdV - VdP$$

$V = \text{volumen (m}^3\text{)}, P = \text{Presión (Pa)}$

Guía de cálculos de reacciones químicas 21



BALANCES DE ENERGÍA



TRANSFERENCIA DE ENERGÍA

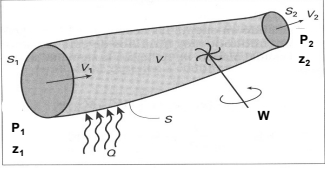
Formas de transferencia de energía:

- **Sistemas cerrados:**
 - No hay transferencia de materia
 - Energía transferida mediante calor y trabajo
- **Sistemas abiertos:**
 - Se transfiere materia
 - Energía transferida mediante calor, trabajo y energía que contiene la materia transferida

Guía de cálculos de reacciones químicas 22

BALANCES DE ENERGÍA

Entrada = Salida + Acumulación

$$\left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{entra} \\ \text{del exterior} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{sale} \\ \text{al exterior} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Energía} \\ \text{acumulada} \\ \text{en el sistema} \end{array} \right)$$


$$\frac{d(Ec + Ep + U)}{dt} = [(Ec_1 + Ep_1 + U_1) - (Ec_2 + Ep_2 + U_2)] + [P_1V_1 - P_2V_2] + (Qe - Qs) + (We - Ws)$$

Si el sistema es estacionario Ac=0

$$\left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{entra} \\ \text{del exterior} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{sale} \\ \text{al exterior} \end{array} \right)$$

$$0 = [(Ec_1 + Ep_1 + U_1) - (Ec_2 + Ep_2 + U_2)] + [P_1V_1 - P_2V_2] + (Qe - Qs) + (We - Ws)$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 23

BALANCES DE ENERGÍA

Ejemplo: En un proceso químico:

Entrada - Consumo + Generación = Salida + Acumulación

$$\left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{entra} \\ \text{del exterior} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Calor} \\ \text{de reacción} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{sale} \\ \text{al exterior} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Energía} \\ \text{acumulada} \\ \text{en el sistema} \end{array} \right)$$

$$(Qe - Qs) + (-r_A)V(-\Delta H_{RA}) = \frac{dT}{dt}(m\bar{C}_p + m_R\bar{C}_{pR})$$

Si el sistema es estacionario Ac=0

$$\left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{entra} \\ \text{del exterior} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Calor} \\ \text{de reacción} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Energía que} \\ \text{sale} \\ \text{al exterior} \end{array} \right)$$

$$(Qe - Qs) + (-r_A)V(-\Delta H_{RA}) = 0$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 24

BALANCES DE ENERGÍA

Si el sistema es estacionario $Ac=0$

$$0 = [(Ec_1 + Ep_1 + U_1) - (Ec_2 + Ep_2 + U_2)] + [P_1V_1 - P_2V_2] + (Qe - Qs) + (We - Ws)$$

$$H = U + PV$$

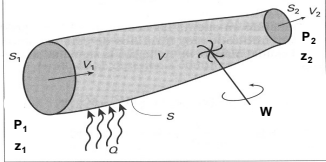
$$mg(z_2 - z_1) + \frac{1}{2}m(v_2^2 - v_1^2) + (H_2 - H_1) = Q + W$$

Dividiendo entre la masa $u = U/m; q = Q/m; w = W/m$

$$h = H/m = u + P/\rho$$

$$g(z_2 - z_1) + \frac{1}{2}(v_2^2 - v_1^2) + (h_2 - h_1) = q + w$$

Variación de **energía mecánica** Variación de **entalpía**



Guía de cálculos de reacciones químicas 25

BALANCES ENTÁLPICOS

En un proceso químico, en estado estacionario, si se desprecian las variaciones de energía mecánica ($\Delta E_c + \Delta E_p = 0$) y el trabajo mecánico ($W=0$)


$$0 + (H_2 - H_1) + 0 = Q + 0$$

$$(H_2 - H_1) = Q$$


Aplicación

- **Sistemas en régimen estacionario que intercambian calor con el medio.**
- **Incluye cambios en la temperatura, en el estado de agregación o en la naturaleza química de las sustancias.**

Guía de cálculos de reacciones químicas 26




BALANCES ENTÁLPICOS




Balances entálpicos

- Son imprescindibles en equipos en los que el intercambio de energía sea determinante,
- cuando haya que calentar o enfriar un fluido: cambiadores de calor, evaporadores, columnas de destilación, etc., es decir,.
- Cuando haya una **reacción química**, porque siempre genera o consume calor
- Imprescindible para el diseño de los reactores químicos**, para asegurarse de que la temperatura del reactor permanezca dentro del intervalo deseado, especialmente cuando los efectos térmicos de la reacción sean importantes. En reacciones bioquímicas dichos efectos no suelen ser muy significativos, así que se podrán ignorar en el dimensionamiento preliminar de los fermentadores o reactores enzimáticos, siempre que se justifique.

Guía de cálculos de reacciones químicas **27**



BALANCES ENTÁLPICOS



BALANCES DE ENTALPÍA


Entalpía

- función de estado del sistema.
- Valor relativo:** No existe una medida absoluta. Se define con respecto a un estado de referencia al que se le asigna el valor de entalpía nulo.
- Magnitud extensiva:** asociada a la cantidad total de energía contenida en las sustancias que toman parte en el proceso.


$$\left(\begin{matrix} \text{Entalpía} \\ \text{Total} \end{matrix} \right) [J] = \left(\begin{matrix} \text{Cantidad} \\ \text{de materia} \end{matrix} \right) [kg] \times \left(\begin{matrix} \text{Entalpía} \\ \text{específica} \end{matrix} \right) [J/kg]$$

- Aditiva:** permite establecer las ecuaciones de balance de energía.
- $\Delta H < 0$ proceso exotérmico
- $\Delta H > 0$ proceso endotérmico

Guía de cálculos de reacciones químicas **28**



BALANCES ENTÁLPICOS



Cálculo de la entalpía

• **Estado de referencia:**

- El correspondiente a los elementos libres de todas las sustancias a una presión y temperatura de referencia (generalmente 1 atm. y 25°C)


Entalpía = calor de formación + calor latente + calor sensible

$$H^T = \sum_i^s m_i H_{fi}^{Tref} + \sum_i m_i \lambda_i + \sum_i m_i C_{p,i} (T - Tref)$$


Fijar un estado de referencia permite:

- Describir el contenido energético asociado al calor sensible de una corriente.
- Utilizar datos termoquímicos obtenidos a temperaturas distintas de las de operación.
- Establecer un procedimiento sencillo para describir la variación de entalpía de sistemas industriales complejos.

Guía de cálculos de reacciones químicas 29




BALANCES ENTÁLPICOS




Estado de referencia. ¿Cómo fijarlo?

- Si el proceso involucra reacción química:
 - Se toma como T_{ref} aquella para la cual se calcula o se dispone del calor de reacción o de las entalpías de formación
- Si el proceso involucra sólo cambio de temperatura:
 - La T_{ref} se escoge de manera que simplifique el cálculo de la variación energética en el sistema.
- Si el proceso involucra cambio de fase:
 - Se toma como T_{ref} aquella para la cual se da el calor latente correspondiente al cambio de estado de agregación o fase

Guía de cálculos de reacciones químicas 30



BALANCES ENTÁLPICOS



Entalpía de reacción


En un proceso en estado estacionario con reacción química

$$\Delta H_r^{T_{ref}} + \sum H_s^{T_{ref}} - \sum H_e^{T_{ref}} = Q$$


$$\sum H_{e,s} = \sum_i^{e,s} m_i C_{p,i} \Delta T + \sum_i^{e,s} m_i \lambda_i$$

$$\Delta H_r = \sum_i^s m_i H_{formación}^{productos} - \sum_i^e m_i H_{formación}^{reactivos}$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 31

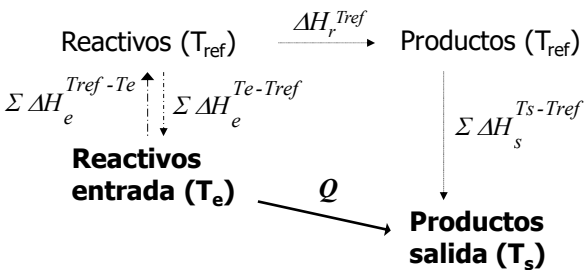


BALANCES ENTÁLPICOS



LEY de HESS

La entalpía es función de estado, no depende del camino recorrido, sólo de los estados final e inicial



$$\sum \Delta H_e^{T_{ref}-T_e} + \Delta H_r^{T_{ref}} + \sum \Delta H_s^{T_s-T_{ref}} = Q$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 32

BALANCES ENTÁLPICOS

Aplicación de la ley de HESS al balance de entalpía

- Empleando datos a la temperatura de referencia

$$\Sigma \Delta H_e^{Tref-Te} + \Delta H_r^{Tref} + \Sigma \Delta H_s^{Ts-Tref} = Q$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 33

BALANCES ENTÁLPICOS

Aplicación de la ley de HESS al balance de entalpía

- Directamente:

$$\Delta H_r^{Te} + \Sigma \Delta H_s^{Ts-Te} = Q$$

$$\Sigma \Delta H_s^{Ts-Te} = \underbrace{\sum_i m_i C_{p,i} \Delta T_{s,e}}_{\text{Cambio calor sensible}} + \underbrace{\sum_i m_i \lambda_i}_{\text{Cambio calor latente}}$$

$$\Delta H_r^{Ts} + \Sigma \Delta H_e^{Ts-Te} = Q$$

$$\Sigma \Delta H_e^{Ts-Te} = \sum_i^e m_i C_{p,i} \Delta T_{s,e} + \sum_i^e m_i \lambda_i$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 34

BALANCES ENTÁLPICOS

Planteamiento general del balance entálpico en un reactor

$$\text{Corriente e} \rightarrow \boxed{\text{Reactor}} \rightarrow \text{Corriente s}$$

$$T_e \quad \text{Componentes A y B} \quad T_s \quad \text{Componente C}$$

$$\boxed{\Delta H_r + \sum H_s - \sum H_e = Q}$$

1)
$$\Delta H_r = \Delta H_r^{T_{ref}} = \sum_s m_s H_{formac.}^{T_{ref}} - \sum_e m_e H_{formac.}^{T_{ref}}$$

2)

	$\sum H_e = \sum_e \Delta H_e^{T_e - T_{ref}}$	$\sum H_s = \sum_s \Delta H_s^{T_s - T_{ref}}$
A	$m_A C_{p,A} (T_e - T_{ref})$	--
B	$m_B C_{p,B} (T_e - T_{ref})$	--
C	--	$m_C C_{p,C} (T_s - T_{ref})$

Guía de cálculos de reacciones químicas 35

BALANCES DE ENTALPÍA


Balance entálpico con cambio de estado de agregación

$$\begin{array}{ccc} A + B (T_{ref}) & \xrightarrow{\Delta H_r^{T_{ref}}} & C_{líquido} (T_{ref}) \\ \downarrow \Sigma H_e & & \downarrow \\ A + B (T_e) & \xrightarrow{T' = T_{cambio\ estado}} & C_{vapor} (T_s) \\ & \searrow Q & \end{array}$$

$$\Sigma H_s = m_C C_{p,C} (líq.) (T' - T_{ref}) + m_C \lambda_C^{T'} + m_C C_{p,C} (vap.) (T_s - T')$$


	ΣH_e	ΣH_s
A	$m_A C_{p,A} (T_e - T_{ref})$	--
B	$m_B C_{p,B} (T_e - T_{ref})$	--
C	--	$m_C C_{p,C} (líquido) (T' - T_{ref}) + m_C \lambda_C^{T'} + m_C C_{p,C} (vapor) (T_s - T')$

Guía de cálculos de reacciones químicas 36



UCM
INGENIERÍA QUÍMICA


BALANCES DE ENTALPÍA



Procedimiento general para resolver balances de entalpía


1. Realizar el balance de materia del sistema.
2. Planteamiento del proceso.
3. Reunir de manera ordenada los datos disponibles para el balance entálpico. Unificar unidades.
4. Definir una temperatura de referencia.
5. Plantear las ecuaciones del balance entálpico.
6. Resolver dichas ecuaciones.
7. Escalar cuando sea necesario

Guía de cálculos de reacciones químicas
37



UCM
INGENIERÍA QUÍMICA

EJEMPLO

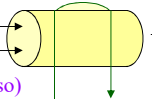


Una caldera utiliza metano como combustible. Al quemador se alimenta aire en un 15% de exceso sobre el estequiométrico. El metano se alimenta a 25 °C y el aire a 100 °C. Los gases de combustión abandonan la caldera a 500 °C. Determinar la cantidad de vapor de agua saturado a 20 atm (temperatura de equilibrio, 213 °C) que se produce en la caldera si a la misma se alimenta agua a 80 °C.

CH₄, 25 °C

Aire (15% exceso)
100 °C

Agua 80 °C



500 °C

Agua vapor (20 atm
T_{equilibrio} = 213 °C)

$\left\{ \begin{array}{l} - \text{CO}_2 \\ - \text{O}_2 \\ - \text{N}_2 \\ - \text{H}_2\text{O} \end{array} \right.$

$\Delta H_c \text{ metano (25°C)} = -55600 \text{ kJ/kg}$

$$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$$

1. Balance de materia:

B.C. 100 kmoles CH₄

Aire $\left\{ \begin{array}{l} - \text{O}_2 = 230 \text{ kmoles} \\ - \text{N}_2 = 865,2 \text{ kmoles} \end{array} \right.$

$\left\{ \begin{array}{l} - \text{CO}_2 = 100 \text{ kmoles} \\ - \text{O}_2 = 30 \text{ kmoles} \\ - \text{N}_2 = 865,2 \text{ kmoles} \\ - \text{H}_2\text{O} = 200 \text{ kmoles} \end{array} \right.$

Guía de cálculos de reacciones químicas
38

EJEMPLO

CH₄, 25 °C
Aire (15% exceso)
100 °C
Agua 80 °C
Agua vapor (20 atm)
T_{equilibrio} = 213 °C
500 °C
- CO₂
- O₂
- N₂
- H₂O
ΔH_c metano (25 °C) = -55600 kJ/kg
C_p (kJ/kg)
CH₄ + O₂ → CO₂ + 2 H₂O

2,3. Planteamiento y reunión ordenada de datos:

Comp.	Entrada			Salida		
	kmol	kg	T ^a (°C)	kmol	kg	T ^a (°C)
CH ₄	100	1600	25	-	-	-
O ₂	230	7360	100	30	960	500
N ₂	865,2	24225	100	865,2	24225	500
H ₂ O	-	-	-	100	4400	500
CO ₂	-	-	-	200	3600	500

Guía de cálculos de reacciones químicas 39

EJEMPLO

CH₄, 25 °C
Aire (15% exceso)
100 °C
Agua 80 °C
Agua vapor (20 atm)
T_{equilibrio} = 213 °C
500 °C
- CO₂
- O₂
- N₂
- H₂O

$\sum \Delta H_e^{Te-Tref} + \sum \Delta H_r^{Tref} + \sum \Delta H_s^{Ts-Tref} = Q$

4. Definir T_{ref}:
T^a de referencia = 25 °C, porque nos dan: ΔH_c metano (25 °C) = -55600 kJ/kg

5 y 6. Plantear y resolver las ecuaciones:

Entrada: $\sum \Delta H_e^{Te-Tref} = \underbrace{\sum_i m_i C_{p,i} \Delta T_{e,ref}}_{\text{Cambio calor sensible}} + \underbrace{\sum_i m_i \lambda_i}_{\text{Cambio calor latente}}$ Ningún compuesto sufre cambio de estado entre esas t^{as}

$\sum \Delta H_e^{Te-Tref} = [(1600) \text{ kg} (2,19) \text{ kJ} / \text{kg}^\circ \text{C} (25 - 25)^\circ \text{C}] + [(7360)(1,04)(100 - 25)] + [(24225)(1,09)(100 - 25)] = 255453 \text{ kJ}$

CH₄ O₂ N₂

Guía de cálculos de reacciones químicas 40

EJEMPLO

CH₄, 25 °C
Aire (15% exceso)
Agua 80 °C
Agua vapor (20 atm
T_{equilibrio}=213°C)

500 °C

- CO₂
- O₂
- N₂
- H₂O

Salida: $\Sigma \Delta H_s^{Ts-Tref} = \underbrace{\sum_i m_i C_{p,i} \Delta T_{s,ref}}_{\text{Cambio calor sensible}} + \underbrace{\sum_i m_i \lambda_i}_{\text{Cambio calor latente}}$ → H₂O

$$\Sigma \Delta H_s^{Ts-Tref} = \overbrace{[(960)(1,04) + (24225)(1,09) + (4400)(0,95)] \text{ kg} \cdot \text{kJ} / \text{kg}^\circ \text{C} + [(500 - 25)^\circ \text{C}]}^{\text{CO}_2, \text{O}_2, \text{N}_2} +$$

$$+ \underbrace{[(3600)(1,96)(500 - 100) + (3600) \text{ kg}(2382) \text{ kJ} / \text{kg} + (3600)(4,18)(100 - 25)]}_{\text{H}_2\text{O}} = 27528744,4 \text{ kJ}$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 41

EJEMPLO

CH₄, 25 °C
Aire (15% exceso)
Agua 80 °C
Agua vapor (20 atm
T_{equilibrio}=213°C)

500 °C

- CO₂
- O₂
- N₂
- H₂O

Reacción: $\Sigma \Delta H_r^{Tref} = 1600 \text{ kg CH}_4 \cdot (-55600 \text{ kJ} / \text{kg}_{\text{CH}_4}) = -88,9 \cdot 10^6$

$$Q = \Sigma \Delta H_e^{Te-Tref} + \Sigma \Delta H_r^{Tref} + \Sigma \Delta H_s^{Ts-Tref} =$$

$$= 27,5 \cdot 10^6 - 0,25 \cdot 10^6 - 88,9 \cdot 10^6 = -64 \cdot 10^6 \text{ kJ}$$

Balance en el reactor

$$Q = m_{\text{H}_2\text{O}} \cdot c_{pL} \cdot (\Delta T) + m_{\text{H}_2\text{O}} \lambda \quad \text{Balance en el cambiador}$$

$$64 \cdot 10^6 = m_{\text{H}_2\text{O}} \cdot 4,18 \text{ kJ} / \text{kg}^\circ \text{C} \cdot (213 - 80)^\circ \text{C} + m_{\text{H}_2\text{O}} 1885 \text{ kJ} / \text{kg}$$


$m_{\text{H}_2\text{O}} = 26219 \text{ kg}$

Guía de cálculos de reacciones químicas 42





3. CINÉTICA

Guía de cálculos de reacciones químicas 43




MODELOS CINÉTICOS




Esquemas de reacción:

- **Reacciones simples:** $A \rightarrow R$ o tb. $A+B \rightarrow R+P$
Una ecuación estequiométrica y una ecuación cinética
- **Reacciones complejas o múltiples:**
 - En serie: $A \rightarrow R \rightarrow S$
 - En paralelo: $A \rightarrow R$ y a la vez $A \rightarrow S$
los reactivos pueden reaccionar de distintas formas y dar diferentes productos.
 - Consecutivas: $A+B \rightarrow R$ y después $R+B \rightarrow S$
Uno de los productos reacciona con uno de los reactivos

Guía de cálculos de reacciones químicas 44



MODELOS CINÉTICOS




Velocidad de reacción:

- **número de moles de reactivo convertidos por unidad de tiempo y volumen o número de moles de producto formados por unidad de tiempo y volumen**


Ecuación cinética:

- **Expresión matemática que relaciona la velocidad de reacción con las variables de que depende: concentración de reactivos y productos en el medio, temperatura, Presión.**

Guía de cálculos de reacciones químicas 45



MODELOS CINÉTICOS



Velocidad de reacción:

- N_A = número de moles de reactivo A
- V = volumen de reacción
- r_A = velocidad de reacción

$$(r_A) = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt}$$


- **Si lo expresamos en función de la concentración de A (CA)** $N_A = VC_A$

$$(r_A) = \frac{1}{V} \frac{d(VC_A)}{dt} = \frac{d(C_A)}{dt} + \frac{C_A}{V} \frac{d(V)}{dt}$$


- **Si el volumen es constante:** $\frac{d(V)}{dt} = 0$

$$(r_A) = \frac{dC_A}{dt}$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 46



MODELOS CINÉTICOS




Otras expresiones de la velocidad intensiva de reacción:


- **Reacciones heterogéneas: velocidad basada en unidad de superficie de interfase (S)** $(r'_A) = \frac{1}{S} \frac{dN_A}{dt}$
- **Si no se conoce S, se puede expresar:**
 - **en función del volumen del sólido (V_s)** $(r''_A) = \frac{1}{V_s} \frac{dN_A}{dt}$
 - **En función de la masa de sólido (W)** $(r'''_A) = \frac{1}{W} \frac{dN_A}{dt}$

$$Vr_A = Sr'_A = V_sr''_A = Wr'''_A$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 47



MODELOS CINÉTICOS



Ecuación cinética de tipo potencial


• $aA + bB \rightarrow cC + dD$

$$(-r_A) = \frac{dC_A}{dt} = k(C_A)^\alpha (C_B)^\beta \quad k = f(T, P, \text{catalizador})$$

Reactivo que se consume


- **k es la constante cinética.**
- **α y β son los órdenes de reacción**
- **Orden total o global de reacción: $n = \alpha + \beta$**
- **El orden de reacción no tiene porqué coincidir con el coeficiente estequiométrico**

Guía de cálculos de reacciones químicas 48



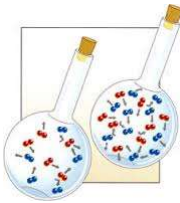
UCM
INGENIERÍA QUÍMICA

MODELOS CINÉTICOS




El orden de reacción no tiene porqué coincidir con el coeficiente estequiométrico

- **Reacciones elementales:**
 - El orden de reacción coincide con el coeficiente estequiométrico. Suelen ser muy simples: $A+B \rightarrow R$
 - Mecanismo de reacción implica colisión directa de una molécula de A con otra de B
- **Reacciones no elementales:**
 - El orden de reacción no coincide con el coeficiente estequiométrico
 - Combinación de reacciones elementales




Guía de cálculos de reacciones químicas

49



UCM
INGENIERÍA QUÍMICA

MODELOS CINÉTICOS



Ecuación cinética de tipo mecanístico

- $aA + bB \rightarrow R$

$$(r_R) = \frac{k_1(C_A)^\alpha(C_B)^\beta}{k_2C_R} \quad k_1, k_2 = f(T, P, \text{catalizador})$$

- **Reacciones complejas donde el mecanismo es una combinación de reacciones elementales.**

Guía de cálculos de reacciones químicas

50

MODELOS CINÉTICOS

La constante cinética y su dependencia de la temperatura.

Ley de Arrhenius

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = k(C_A)^\alpha (C_B)^\beta$$

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

•Ecuación de Arrhenius:

- **k:** constante cinética (dependiente de la temperatura)
- **A:** factor preexponencial o factor de frecuencia. Refleja la frecuencia de las colisiones.
- **E_a:** energía de activación, expresada en kJ/mol.
- **R:** constante universal de los gases = 8,3143 J·K⁻¹·mol⁻¹
- **T:** temperatura absoluta [expresada en K]

Guía de cálculos de reacciones químicas 51

MODELOS CINÉTICOS

La constante cinética y su dependencia de la temperatura. Ley de Arrhenius

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = k(C_A)^\alpha (C_B)^\beta$$

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$


•Ecuación de Arrhenius:

- **Para poder calcular A y Ea se puede utilizar esta expresión**


$$\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right)$$

$$Y = a + bX \left\{ \begin{array}{l} Y = \ln(k) \\ X = \left(\frac{1}{T} \right) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} a = \ln(A) \\ b = -\frac{E_a}{R} \end{array}$$

Guía de cálculos de reacciones químicas 52



EJEMPLOS




Ejemplo 1. Dada la reacción $4A + B \rightarrow 2S + 2T$. ¿Cuál es la relación entre las velocidades de formación y desaparición de los componentes de la reacción ?

$$\begin{aligned}
 N_{A0} - N_A &= N_{A0} x_A & -\frac{dN_A}{dt} &= N_{A0} \frac{dx_A}{dt} \\
 N_{B0} - N_B &= \frac{1}{4} N_{A0} x_A & -\frac{dN_B}{dt} &= \frac{1}{4} N_{A0} \frac{dx_A}{dt} \\
 N_{S0} + N_S &= \frac{1}{2} N_{A0} x_A & \frac{dN_S}{dt} &= \frac{1}{2} N_{A0} \frac{dx_A}{dt} \\
 N_{T0} + N_T &= \frac{1}{2} N_{A0} x_A & \frac{dN_T}{dt} &= \frac{1}{2} N_{A0} \frac{dx_A}{dt}
 \end{aligned}$$


$$\frac{1}{4} \frac{d(N_A)}{dt} = -\frac{d(N_B)}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d(N_S)}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d(N_T)}{dt}$$

$$r = \frac{(r_j)}{\nu_j} = -\frac{1}{4}(r_A) = -(r_B) = \frac{1}{2}(r_S) = \frac{1}{2}(r_T)$$

Guía de cálculos de reacciones químicas **53**



EJEMPLOS



Ejemplo 2. Empleo de la ecuación cinética.
 Se lleva a cabo una reacción química $A \rightarrow R$, a $T = \text{constante}$ y $C_{A0} = 2 \text{ mol/l}$.
 En 10 minutos se obtiene una $x_A = 0,3$. ¿Cuánto vale x_A a los 40 min ?, en los siguientes casos :

- La reacción es de orden 1.
- La reacción es de orden 2.
- La reacción es de orden $\frac{1}{2}$.


a) La reacción es de orden 1. $(-r_A) = C_{A0} \frac{dx_A}{dt} = k C_{A0} (1 - x_A)$

$$\frac{dx_A}{dt} = k(1 - x_A) \quad \frac{dx_A}{(1 - x_A)} = k dt \quad \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(1 - x_A)} = \int_0^t k dt$$


$$-\ln(1 - x_A) = kt \Rightarrow k = \frac{-\ln(1 - x_A)}{t} \Rightarrow k = \frac{-\ln(1 - 0.3)}{10} = 0.0357 \text{ min}^{-1}$$

$$x_A = 1 - e^{-kt} = 0.76$$

Guía de cálculos de reacciones químicas **54**



EJEMPLOS



b) La reacción es de orden 2. $(-r_A) = C_{A0} \frac{dx_A}{dt} = kC_{A0}^2(1-x_A)^2$

$$\frac{dx_A}{dt} = kC_{A0}(1-x_A)^2 \quad \frac{dx_A}{(1-x_A)^2} = C_{A0}kdt \quad \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{(1-x_A)^2} = C_{A0} \int_0^t kdt$$

$$\frac{x_A}{1-x_A} = kC_{A0}t \Rightarrow k = \frac{x_A}{C_{A0}t(1-x_A)} \Rightarrow k = 0.214 \text{ mol}^{-1} \text{ min}^{-1}$$

$x_A = 0.63$

c) La reacción es de orden 1/2.


$$(-r_A) = C_{A0} \frac{dx_A}{dt} = k\sqrt{C_{A0}(1-x_A)}$$

$$k = 0.046 \text{ mol}^{1/2} \text{ l}^{-1/2} \text{ min}^{-1}$$


$$x_A = 0.88$$

Guía de cálculos de reacciones químicas

55



EJEMPLOS



Ejemplo 3. Empleo de Arrhenius
La velocidad de una reacción a 30°C es el doble que a 20°C. Calcule la energía de activación.

$$\left. \begin{aligned} (-r_A)_{20} &= k_{20} C_A^n \\ (-r_A)_{30} &= k_{30} C_A^n \end{aligned} \right\} \quad (-r_A)_{30} / (-r_A)_{20} = k_{30} / k_{20} = 2 \quad k = Ae^{\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T}\right)}$$

$$\frac{k_{30}}{k_{20}} = \frac{Ae^{\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{303}\right)}}{Ae^{\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{293}\right)}} = 2 \quad \ln(2) = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{293} \right)$$

$$R = 1.987 \text{ kcal / K kmol}$$

$$E_a = 122 \text{ kcal / kmol}$$

Para una reacción que tenga una energía de activación mayor, ¿qué relación habrá entre sus velocidades a 20°C y 30°C ?

$\ln(k_{30}/k_{20})$ aumentará, porque es proporcional a $E_a \rightarrow$ la relación aumentará

Guía de cálculos de reacciones químicas

56

EJEMPLOS

Ejemplo 4. Obtención de la ecuación cinética

La reacción en fase líquida $A \rightarrow R + S$, a 70°C , presenta la siguiente evolución de C_A con el tiempo:

C_A (mol/l)	1	0.83	0.71	0.63	0.56	0.46	0.33
t (min)	0	1	2	3	4	6	10

Determinar su ecuación cinética utilizando el método diferencial y el integral.

Guía de cálculos de reacciones químicas 57

EJEMPLOS

Método diferencial

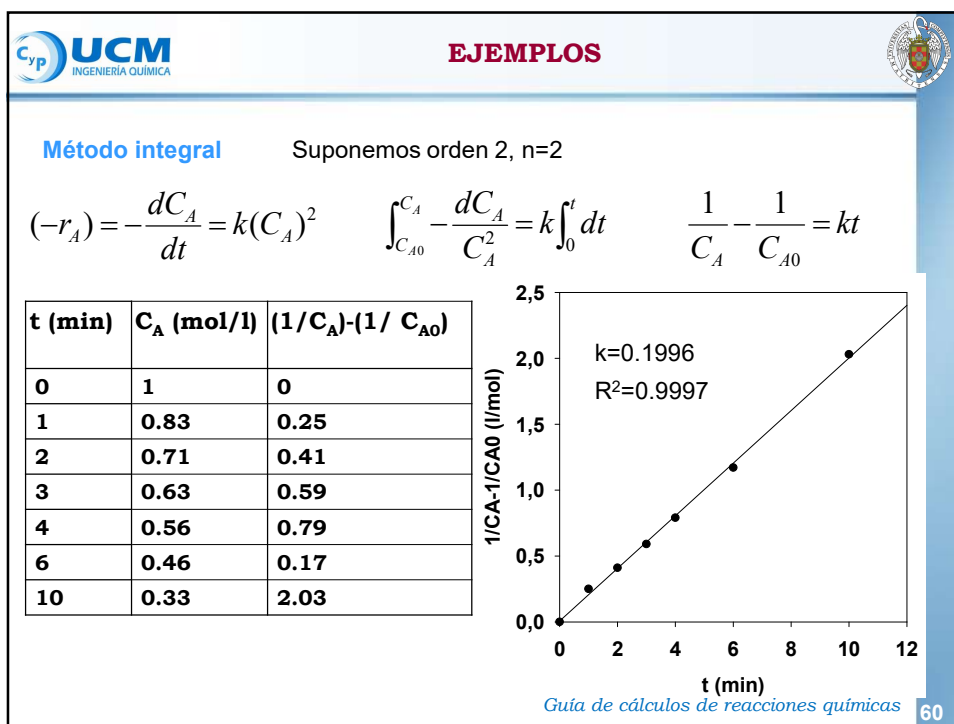
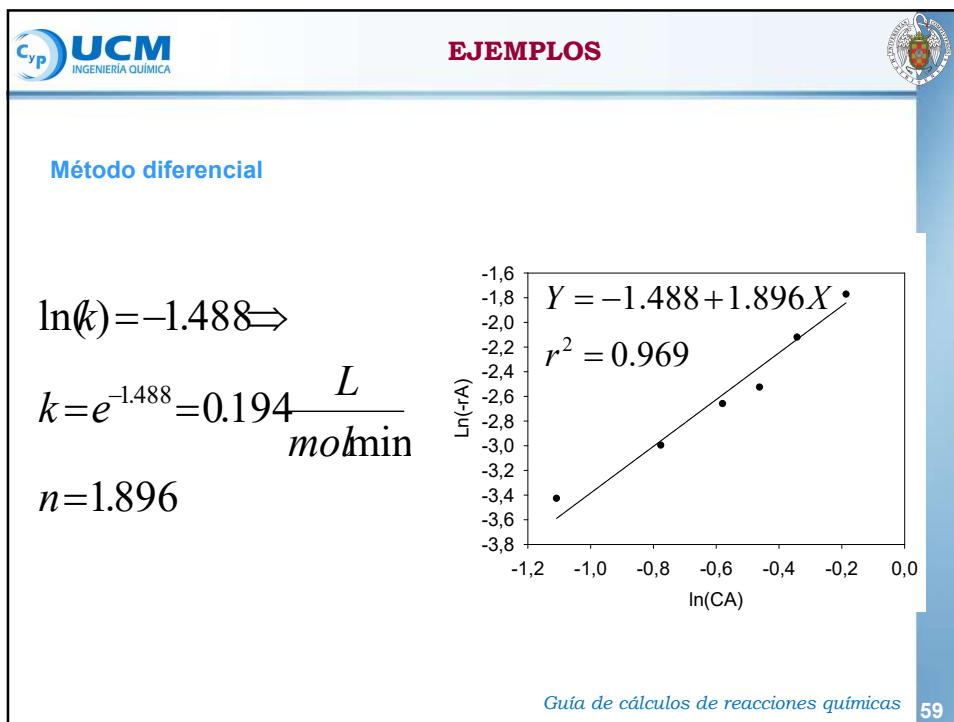
C_A (mol/l)	1	0.83	0.71	0.63	0.56	0.46	0.33
t (min)	0	1	2	3	4	6	10


$- (r_A)$	$\ln (-r_A)$	$\ln (C_A)$
0,17	-1,77	-0,19
0,12	-2,12	-0,34
0,08	-2,53	-0,46
0,07	-2,66	-0,58
0,05	-3,00	-0,78
0,03	-3,43	-1,11

$\ln(k) = -1.488 \Rightarrow k = e^{-1.488} = 0.194 \frac{L}{mol \min}$


$n = 1.896$

Guía de cálculos de reacciones químicas 58





EJEMPLOS




Método integral Comprobación

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = kt \quad C_A = \frac{1}{kt + \frac{1}{C_{A0}}}$$


t (min)	C _A medida (mol/L)	C _A calculada (mol/L)
0	1	1,00
1	0.83	0,83
2	0.71	0,71
3	0.63	0,63
4	0.56	0,56
6	0.46	0,46
10	0.33	0,33

$$(-r_A) = -\frac{dC_A}{dt} = 0.1996(l/mol\ min)(C_A)^2$$

Guía de cálculos de reacciones químicas **61**



EJEMPLOS



Ejemplo 5. Obtención de la energía de activación

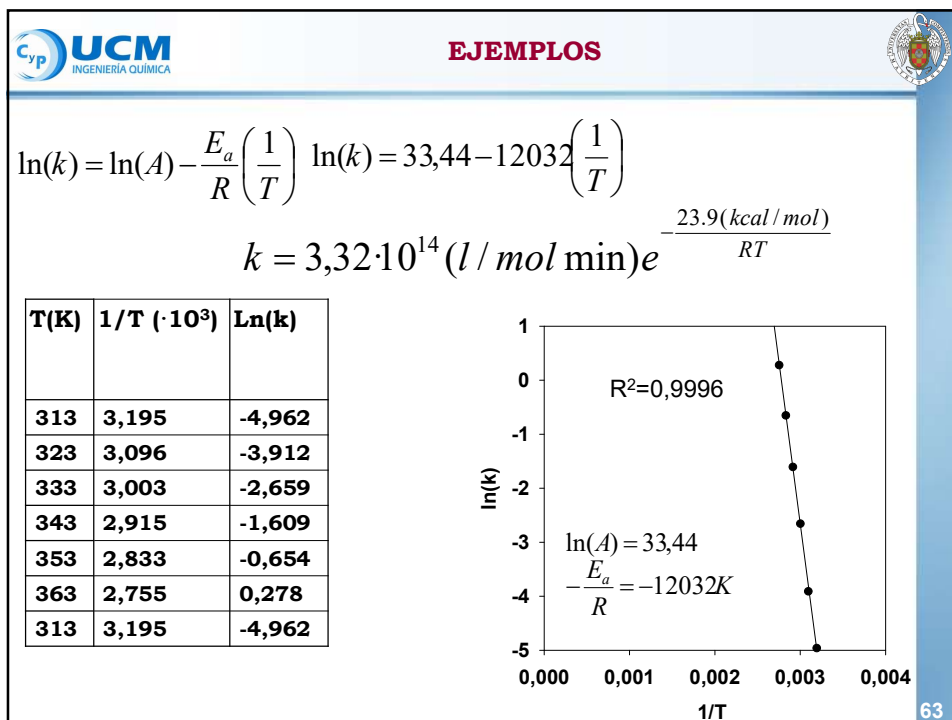
Al repetir la experimentación planteada en el problema anterior, a nuevas temperaturas, se obtiene el mismo modelo cinético, con unos valores de k de acuerdo con:

K (l/mol min)	0.007	0.02	0.07	0.20	0.52	1.32
T (°C)	40	50	60	70	80	90

Calcular todos los parámetros cinéticos posibles.

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} \quad \ln(k) = \ln(A) - \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} \right)$$



Guía de cálculos de reacciones químicas **62**



BIBLIOGRAFÍA

- Calleja Pardo, G.; García Herruzo, F.; de Lucas Martínez, A.; Prats Rico, D. y Rodríguez Maroto, J.M. (1999). "Introducción a la Ingeniería Química". Síntesis. Madrid. Capítulo 7.
- Costa López, J.; Cervera March, S.; Cunill García, F.; Esplugas Vidal, S.; Mans Texeido, C. y Mata Álvarez, J. (1994). "Curso de Ingeniería Química. Introducción a los Procesos, las Operaciones Unitarias y los Fenómenos de Transporte". Reverté. Barcelona. Capítulo 4.
- Felder, R.M. y Rousseau R.W. (1991). "Principios Elementales de los Procesos Químicos". Addison Wesley Iber. Wilmington. Capítulos 7,8 y 9.
- Costa Novella, E.; Sotelo, J.L.; Calleja, G.; Ovejero, G.; de Lucas, A.; Aguado, J. y Uguina, M.A. (1983). "Ingeniería Química. Vol. I. Conceptos Generales". Alhambra. Madrid.
- Reklaitis, G.V. (1983). "Introduction to Material and Energy Balance". John Wiley, New York.

Guía de cálculos de reacciones químicas 64

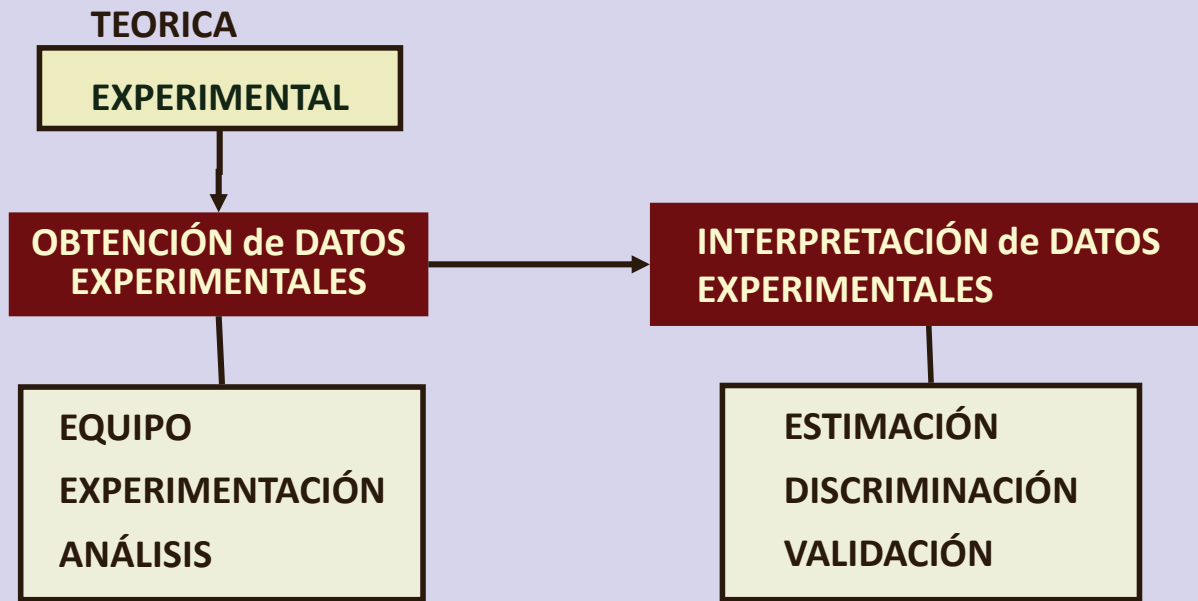


**GUÍA METODOLÓGICA PARA EL EMPLEO DE
HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS DE
CÁLCULOS DE LAS REACCIONES QUÍMICAS**

PARTE 2

Guía de cálculos de reacciones químicas 65

Anexo: Determinación de Modelos Cinéticos



Posibles equipos experimentales

- 1) Lecho fijo (FBR): integral y diferencial. Recirculación. Problema: isothermicidad.
- 2) Lecho fluidizado: integral y diferencial. Problema: descripción de su fluidodinámica.
- 3) Reactor tanque cesta (BSTR): Flujo en mezcla completa. Problema: precio.
- 4) Microrreactor uniparticular: Problema: no es representativo.

Datos experimentales obtenidos en cada equipo

Lecho fijo (FBR) y fluidizado

Datos integrales (X_A vs. t) y diferenciales (r vs. tiempo). $r = X_A / (W/F_{A0})$.

Reactor tanque cesta (BSTR)

Datos diferenciales

Condiciones para la obtención de datos experimentales

Reactor isoterma y generalmente operando en continuo

Ausencia de controles difusionales externo e interno: control R.Q.

Selección de la velocidad lineal de paso de los gases (difusión externa) y el tamaño de partícula (difusión interna) adecuados. Estudio a la T y C_{cat} máximas (velocidad R.Q. máxima)

Empleo de reactores (continuos) con comportamiento lo más próximo a los modelos ideales \Rightarrow Hipótesis de mezcla perfecta // Hipótesis de flujo pistón

Facilidad de operación, muestreo y análisis

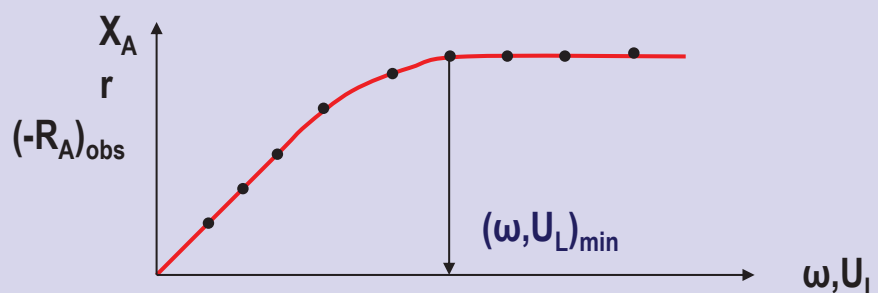
Facilidad de construcción y bajo coste

Unidades (r , $-R_A$) en reacciones catalíticas heterogéneas
 $\text{mol (masa de catalizador)}^{-1} (\text{tiempo})^{-1} : \text{mol g}^{-1} \text{h}^{-1}$

Ausencia de control por parte de los fenómenos de transporte

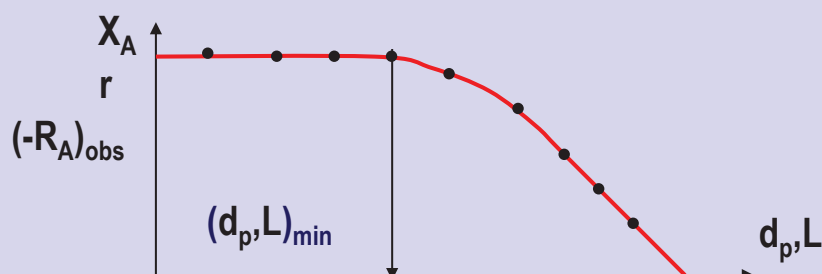
Ausencia de controles difusionales externos

Determinación experimental del flujo mínimo (Re mínimo, h y k_c mínimos)



Ausencia de controles difusionales internos

Determinación experimental del tamaño de partícula mínimo, de C_{cat} mínima



Equipos experimentales: reactor cesta o BSTR (mezcla perfecta)

1. Un experimento realizado a un determinado W y F_{A0} proporciona un valor de conversión X_A y un valor de velocidad.
2. Se necesitan una serie de experimentos realizados a diferentes W/F_{A0} para obtener diferentes pares de valores X_A y $(-R_A)$.
3. Esos pares de valores se utilizarán para la determinación de los parámetros cinéticos (métodos diferenciales)

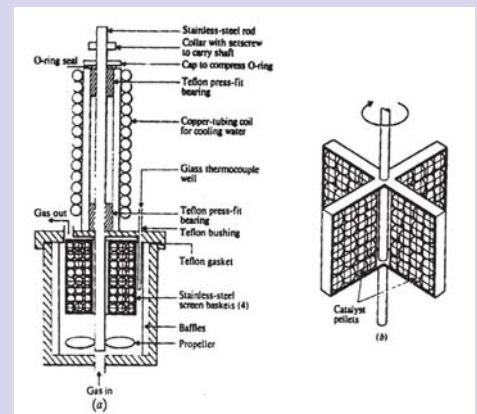
$$F_{A0} \text{ (mol/tiempo)} = C_{A0} \text{ (mol/volumen)} \times Q \text{ (volumen/tiempo)}$$

Balance de materia (isotermo)

$$F_{A0} = F_A + (-R_A) \cdot W = F_{A0}(1 - X_A) + (-R_A) \cdot W$$

$$\frac{W}{F_{A0}} = \frac{X_A}{(-R_A)} \Rightarrow (-R_A) = \frac{X_A}{(W/F_{A0})}$$

Wichgaarden, R.J. y col.
(1998). *Industrial Catalysis:
Optimizing Catalysts and
Processes*. Wiley-VCH.



Equipos experimentales: reactor de lecho fijo (flujo pistón)

1. Un experimento realizado a un determinado W y F_{A0} proporciona un valor de conversión X_A .
2. Se necesitan una serie de experimentos realizados a diferentes W/F_{A0} para obtener una curva de conversión X_A frente al tiempo espacial. Su diferenciación da valores de $(-R_A)$.
3. Si se supone la ecuación cinética, la integración del balance de materia (isotermo) permitirá la obtención de los parámetros cinéticos.

Balance de materia (isotermo)

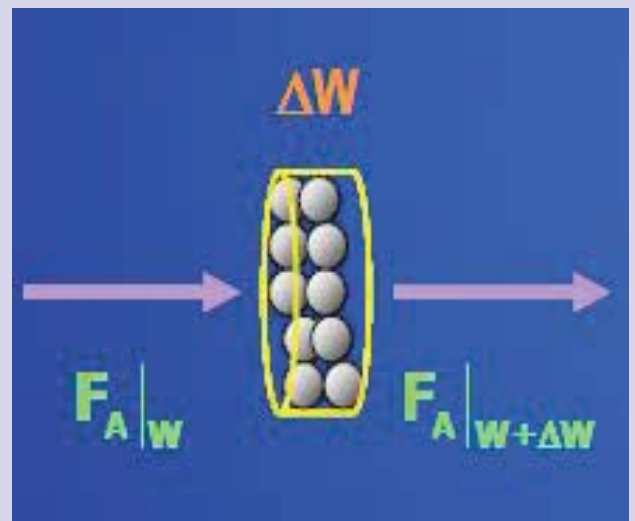
$$F_A|_W = F_A|_{W+dW} + (-R_A) \cdot dW$$

$$F_A|_W = F_A|_W \cdot (1 - dX_A) + (-R_A) \cdot dW$$

$$\rightarrow F_{A0} dX_A = (-R_A) \cdot dW$$

$$\frac{dW}{F_{A0}} = \frac{dX_A}{(-R_A)} \Rightarrow (-R_A) = \frac{dX_A}{d(W/F_{A0})}$$

$$\frac{W}{F_{A0}} = \int_{X_A=X_{Ae}}^{X_A=X_{As}} \frac{dX_A}{(-R_A)}$$



INTERPRETACIÓN de DATOS EXPERIMENTALES

Métodos de regresión para la estimación de parámetros

Modelos lineales en los parámetros

$$y_{\text{calc}} = b_0 + b_1 f_1(x_i) + b_2 f_2(x_i) + \dots + b_n f_n(x_i)$$

Linealizaciones: a) en ausencia de herramientas de análisis no lineal
b) para obtener valores válidos iniciales para el análisis no lineal multiparamétrico

$$r = r_s = \frac{k_1 L \left[P_A - \frac{P_R P_P}{K} \right]}{\left[1 + K_A P_A + K_R P_R \right]} \quad \longrightarrow \quad \frac{\left[P_A - \frac{P_R P_P}{K} \right]}{r_s} = \frac{1}{k_1 L} + \frac{K_A}{k_1 L} P_A + \frac{K_R}{k_1 L} P_R$$

\downarrow

$$y = a + b \cdot x_1 + c \cdot x_2$$

Problema:

La linealización se basa en variables Dependientes y/o independientes no experimentales. Modificación del error.

INTERPRETACIÓN de DATOS EXPERIMENTALES

Modelos no lineales en los parámetros

$$y_{\text{calc}} = f(b_0, b_1, \dots, b_n; x_1, x_2, \dots, x_k)$$

Objetivo: calcular $b_0 \dots b_n$ tal que la suma de residuos al cuadrado sea mínima.

$$\min \sum_{u=1}^N (y_{\text{exp}} - y_{\text{calc}})^2$$

→ 1) Estrategias de función objetivo: Método Simplex o de Nelder y Mead

→ 2) Estrategias de máximo cambio o pendiente:
Método de Gauss-Newton
Método de Marquardt-Levenberg (modificación del anterior)

- Problemas:**
- 1) Correlación entre parámetros (cambios de variables)
 - 2) Presencia de mínimos locales (partir de varios valores iniciales)
 - 3) Robustez de la solución (uso de varias estrategias de cálculo)
 - 4) En métodos basados en gradientes, evitar que las variables difieran mucho en el orden de magnitud.

INTERPRETACIÓN de DATOS EXPERIMENTALES

Criterios de discriminación entre modelos cinéticos propuestos

Criterios físicos

- 1) Valor positivo de las constantes cinéticas
- 2) Evolución de la constante cinética en función de la ecuación de Arrhenius o similares.
- 3) Valores razonables de las energías de activación (<200 kJ/mol, en general)

Criterios estadísticos

- 1) Valor R o R², mejor R² ajustado ("adjusted R²") para sistemas lineales lo más cercano a 1
- 2) Valor F de Fischer al 95% de confianza (lo mayor posible)
Suma de residuos al cuadrado (SRC) (lo menor posible)
Valor de los parámetros de los criterios de información (Akaike, Schwartz...) (lo menor posible) ...para todos los sistemas (lineales y no lineales).
- 3) Significación de los parámetros estimados (error standard, t de Student al 95% de confianza...)

Objetivo: máxima sencillez del modelo y significación de los parámetros junto con el mejor ajuste

INTERPRETACIÓN de DATOS EXPERIMENTALES

Algunos criterios estadísticos para discriminar modelos

N: nº datos

K: nº parámetros

$$F_{95} = \frac{\sum_{i=1}^N y_{calc}^2 / K}{\sum_{i=1}^N (y_{exp} - y_{calc})^2 / (N - K)}$$

$$SQR = SRC = \sum_{i=1}^N (y_{exp} - y_{calc})^2$$

$$AIC = N \cdot \ln\left(\frac{SQR}{N}\right) + 2 \cdot K$$

$$AICc = AIC + \frac{2K \cdot (K + 1)}{N - K - 1}$$

EJEMPLO: SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

Modelo de Michaelis-Menten simple Unisustrato. Reacción irreversible

$$r = \frac{k \cdot C_E \cdot C_S}{1 + K_S \cdot C_S}$$

Modelo de Michaelis-Menten simple Unisustrato. Reacción reversible

$$r = \frac{k \cdot C_E \cdot C_S - k' \cdot C_E C_P}{1 + K_S \cdot C_S + K_P \cdot C_P}$$

A continuación hay una guía para la utilización del programa Aspen Custom Modeler. Esta herramienta permite seleccionar el modelo cinético más adecuado para ajustarse a los datos experimentales, obteniendo los valores óptimos de los parámetros cinéticos y termodinámicos de dicho modelo.

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: PANTALLA INICIAL

Dynamic: simulación
Estimation: ajuste modelos
Flowsheet: arrastrar elementos (bloques, corrientes...)
Custom modeling->Models->add model

Simulation Messages
Preparing simulation for solution
Successfully opened snapshot file.
Simulation ready for solution
Simulation has 13 variables, 4 equations and 18 non-zeros
Number of equations = 4, number of states = 1

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: EJEMPLO DE PROGRAMA

```
programa sistema 1 MM simple reversible Tvar.acmf - Aspen Custom Modeler V7.2 - aspenONE - [Model - marianelaTcte]
File Edit View Search Tools Build Run Window Help
Estimation

1  =Model marianelaTcte
2  // Modelo de Michaelis y Menten simple con Cglicerina como constante
3
4  // Parámetros cinéticos, termodinámicos y variables
5  k1 as realvariable; // constante cinética de la reacción directa
6  k2 as realvariable; // constante cinética de la reacción inversa
7  KI as realvariable; // constante de pseudoequilibrio del ibuprofeno
8  KMG as realvariable; // constante de pseudoequilibrio del monoglicérido
9
10 lnk10 as realvariable; // neperiano del factor preexponencial de la constante cinética de la reacción directa
11 lnk20 as realvariable; // neperiano del factor preexponencial de la constante cinética de la reacción inversa
12
13 Eak1 as realvariable; // energía de activación entre temperatura absoluta para la constante cinética de la reacción directa
14 Eak2 as realvariable; // energía de activación entre temperatura absoluta para la constante cinética de la reacción inversa
15
16 T as realvariable; // temperatura Celsius (°C)
17
18 CIO as realvariable; // concentración inicial de ibuprofeno (mol/L)
19
20 X as realvariable; // conversión del ibuprofeno
21
22 r1 as realvariable; // velocidad de la reacción directa
23
```

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: EJEMPLO DE PROGRAMA

```
24 // <equation_name> : <expression1> = <expression2>;
25
26 // Cálculo de las constantes cinéticas en función de la temperatura absoluta
27
28 k1=exp(lnk10-Eak1/(T+273.16));
29 k2=exp(lnk20-Eak2/(T+273.16));
30
31 // Cálculo de la evolución de la conversión con el tiempo
32
33 $X=(k1*(1-X)-k2*X)/(1+KI*CIO*(1-X)+KMG*CIO*X);
34
35 // Cálculo de la velocidad de la reacción directa
36
37 r1=CIO*$X;
38
39 End
```

→ F8 compilar

→ ¿ok? Arrastrar el programa a la ventana del diagrama de flujo.

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: CONSTRUCCIÓN DIAGRAMA FLUJO

Arrastrar y soltar

Click derecho
Dos veces

Preparation simulation for solution
Successfully opened snapshot file.
Simulation ready for solution
Simulation has 13 variables, 4 equations and 18 non-zeros
Number of equations = 4, number of states = 1

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: TABLA DE PARÁMETROS Y VARIABLES

Tabla de parámetros y variables

Indicar si son Fijos (k, T, Ce)
Iniciales (Cs)

Ok: cuadrado verde

Libres

	Value	Spec
CID	0.097	Fixed
ComponentList	Default	
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
KI	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

Preparation simulation for solution
Successfully opened snapshot file.
Simulation ready for solution
Simulation has 13 variables, 4 equations and 18 non-zeros
Number of equations = 4, number of states = 1

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: SELECCIÓN DEL MODO ESTIMACIÓN

The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'Estimation' menu is open, and the 'Estimation' option is highlighted. A green arrow points from the 'Estimation' menu item to the text '1) Elegir "Estimation"'. Below the menu, a table titled 'B1.AllVariables Table' is displayed, showing various parameters and their values. The table has columns for 'ComponentList', 'Value', and 'Spec'. The 'Value' column contains numerical values, and the 'Spec' column contains categorical values like 'Fixed', 'Free', and 'Initial'.

ComponentList	Value	Spec
C10	0.097	Fixed
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
K1	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

Simulation Messages:

```
Preparing simulation for solution
Successfully opened snapshot file.
Simulation ready for solution
Simulation has 13 variables, 4 equations and 18 non-zeros
Number of equations = 4, number of states = 1
```

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: APERTURA VENTANA ESTIMACIÓN

The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Estimation...' option is highlighted. A green arrow points from the 'Estimation...' menu item to the text 'Menu "Tools": elegir "Estimation"'. Below the menu, a table titled 'B1.AllVariables Table' is displayed, showing various parameters and their values. The table has columns for 'ComponentList', 'Value', and 'Spec'. The 'Value' column contains numerical values, and the 'Spec' column contains categorical values like 'Fixed', 'Free', and 'Initial'.

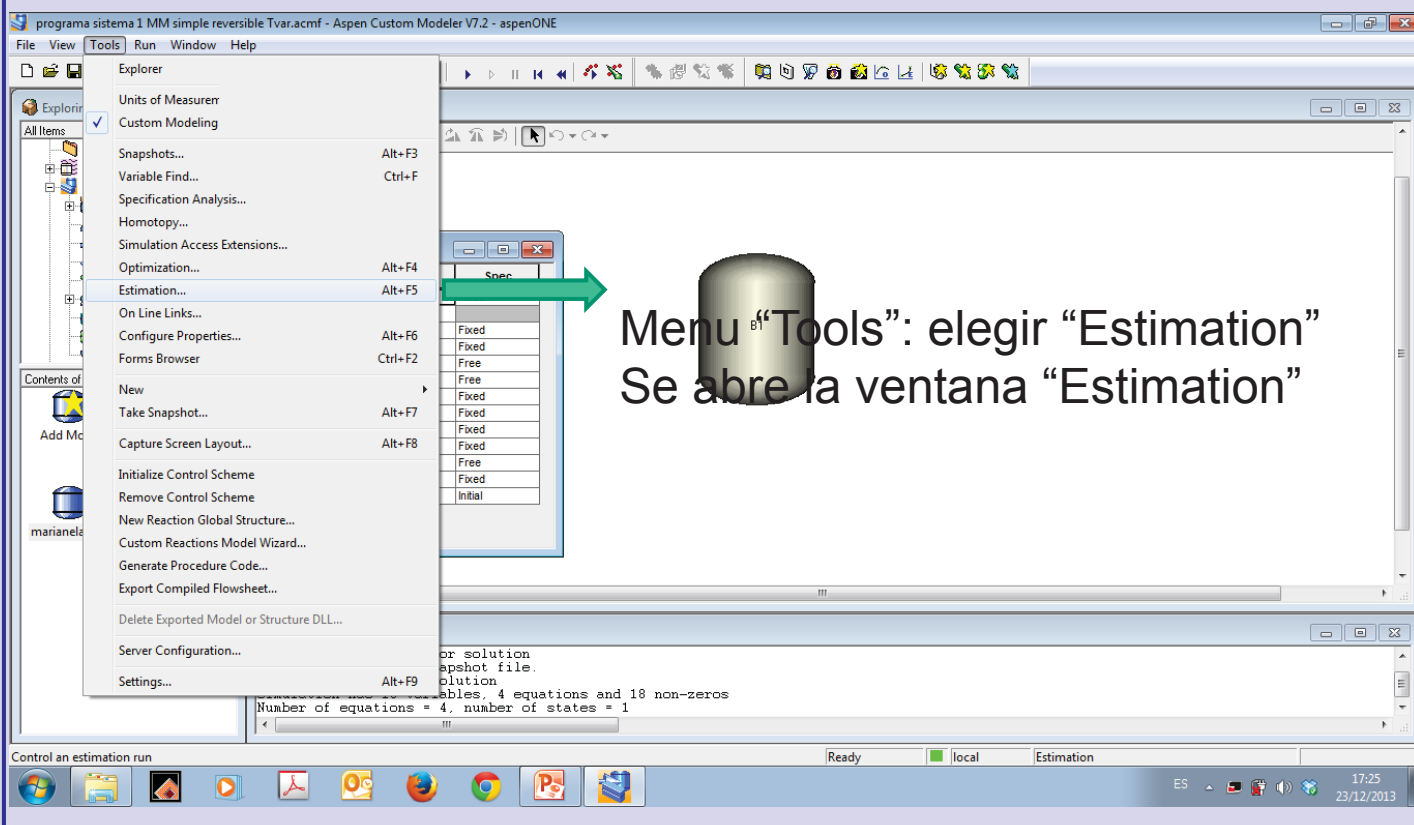
ComponentList	Value	Spec
C10	0.097	Fixed
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
K1	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

Simulation Messages:

```
Preparing simulation for solution
Successfully opened snapshot file.
Simulation ready for solution
Simulation has 13 variables, 4 equations and 18 non-zeros
Number of equations = 4, number of states = 1
```

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

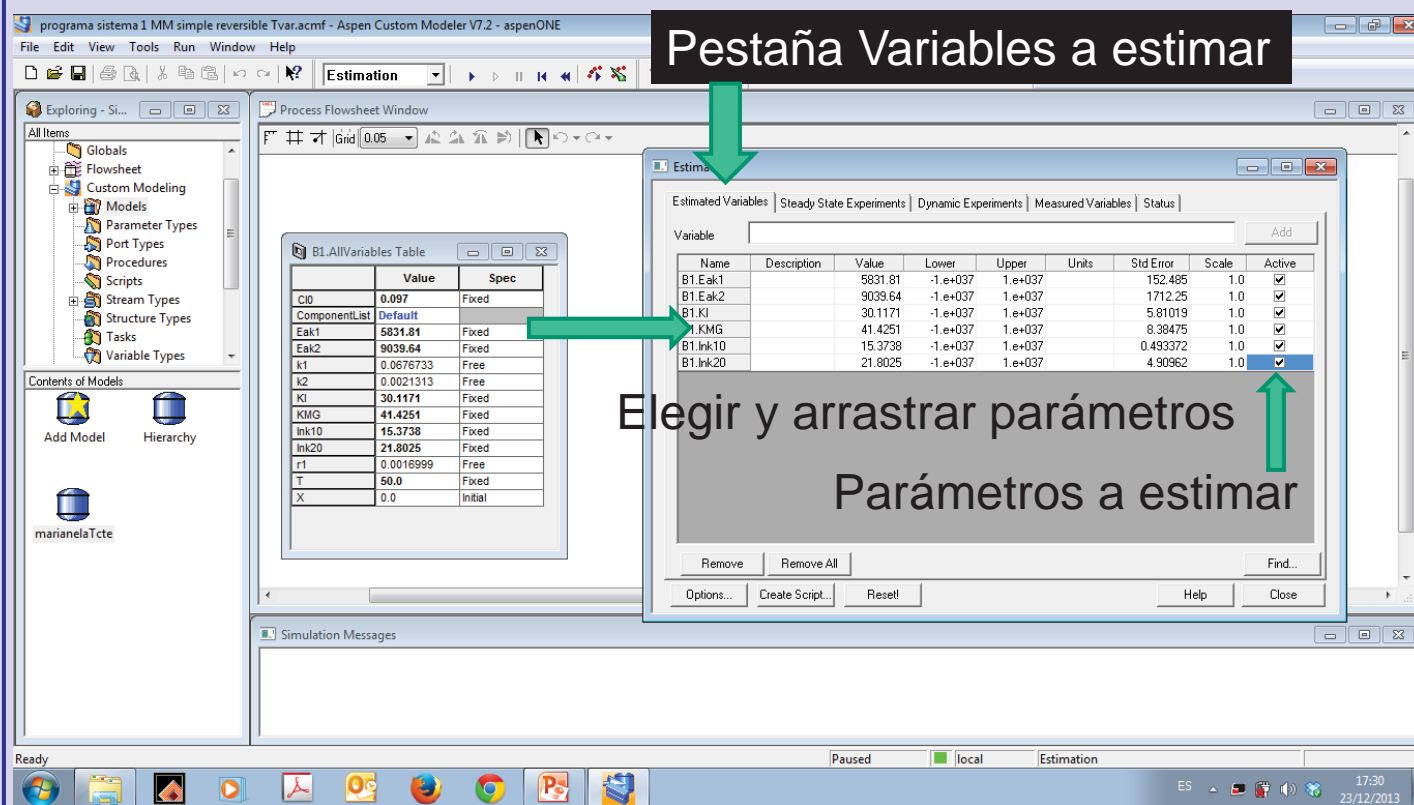
ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: TABLA DE PARÁMETROS Y VARIABLES



Menu "Tools": elegir "Estimation"
Se abre la ventana "Estimation"

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: VENTANA ESTIMACIÓN



Pestaña Variables a estimar

Elegir y arrastrar parámetros
Parámetros a estimar

Name	Description	Value	Lower	Upper	Units	Std Error	Scale	Active
B1.Eak1		5831.81	-1.e+037	1.e+037		152.485	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.Eak2		9039.64	-1.e+037	1.e+037		1712.25	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.K1		30.1171	-1.e+037	1.e+037		5.81019	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.KMG		41.4251	-1.e+037	1.e+037		8.38475	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.Ink10		15.3738	-1.e+037	1.e+037		0.493372	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.Ink20		21.8025	-1.e+037	1.e+037		4.90962	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: VENTANA ESTIMACIÓN

programa sistema 1 MM simple reversible Tvar.acmf - Aspen Custom Modeler V7.2 - aspenONE

File Edit View Tools Run Window Help

Estimation

Pestaña Datos experimentales

Exploring - Si...
All Items
Globals
Flowsheet
Custom Modeling
Models
Parameter Types
Port Types
Procedures
Scripts
Stream Types
Structure Types
Tasks
Variable Types
Contents of Models
Add Model
Hierarchy
marianelaTcte

Process Flowsheet Window
Grid 0.05

BL.AllVariables Table

	Value	Spec
Cl0	0.097	Fixed
ComponentList	Default	
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
KI	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

Estimation

Estimated Variables | Steady State Experiments | Dynamic Experiments | Measured Variables | Status

Name	Weight	Active
sist1T50ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T50ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T50ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>

Remove Remove All New... Edit... Copy...
Options... Create Script... Reset Help Close

Introducción
Datos expto
nuevo

Experimentos seleccionados para el ajuste

Ready Paused local Estimation ES 17:39 23/12/2013

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES

programa sistema 1 MM simple reversible Tvar.acmf - Aspen Custom Modeler V7.2 - aspenONE

File Edit View Tools Run Window Help

Estimation

Ventana nuevo experimento

Exploring - Si...
All Items
Globals
Flowsheet
Custom Modeling
Models
Parameter Types
Port Types
Procedures
Scripts
Stream Types
Structure Types
Tasks
Variable Types
Contents of Models
Add Model
Hierarchy
marianelaTcte

Process Flowsheet Window
Grid 0.05

BL.AllVariables Table

	Value	Spec
Cl0	0.097	Fixed
ComponentList	Default	
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
KI	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

New Experiment

Experiment Title: Nuevo_expto
Experiment Weight: 1
Copy From: <None>
OK Cancel

Estimation

Estimated Variables | Steady State Experiments | Dynamic Experiments | Measured Variables | Status

Name	Weight	Active
sist1T50ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T50ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T50ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T60ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T70ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu100	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu20	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
sist1T80ibu60	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>

Remove Remove All New... Edit... Copy...
Options... Create Script... Reset Help Close

Simulation Messages

Ready Paused local Estimation ES 17:43 23/12/2013

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES

The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'Estimation - Editing Nuevo_expto' window is active, displaying three tabs: 'Measured Variables', 'Fixed Variables', and 'Initial Variables'. Annotations with arrows point to these tabs:

- Variables iniciales** (Initial Variables): Activity remaining....
- Variables fijas en cada expto:** temperature, Cibu0...
- Variables medidas con el tiempo:** Conversion...

The 'B1.AllVariables Table' is visible on the left, showing a list of variables with their values and specifications. The status bar at the bottom indicates 'Ready' and 'local'.

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES

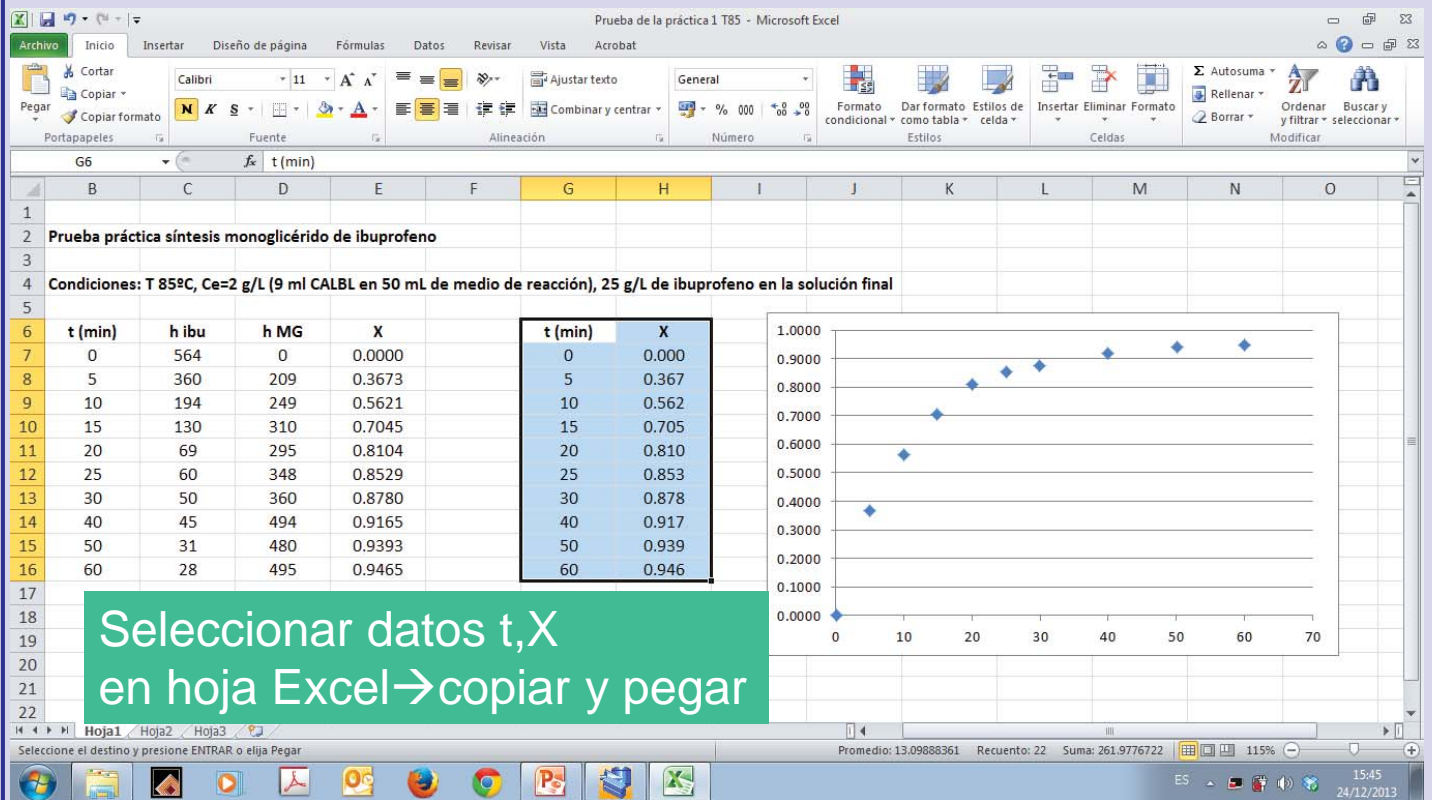
The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'Estimation - Editing Nuevo_expto' window is active, displaying the 'Variable' list. An annotation with an arrow points to the 'Variable' list, indicating the process of dragging variables from the 'B1.AllVariables Table' to the 'Variable' list.

The annotation text reads: **Arrastrar a la casilla "variable" y soltar. Valor en la tabla de parámetros o en una hoja Excel.**

The 'B1.AllVariables Table' is visible on the left, showing a list of variables with their values and specifications. The status bar at the bottom indicates 'Ready' and 'local'.

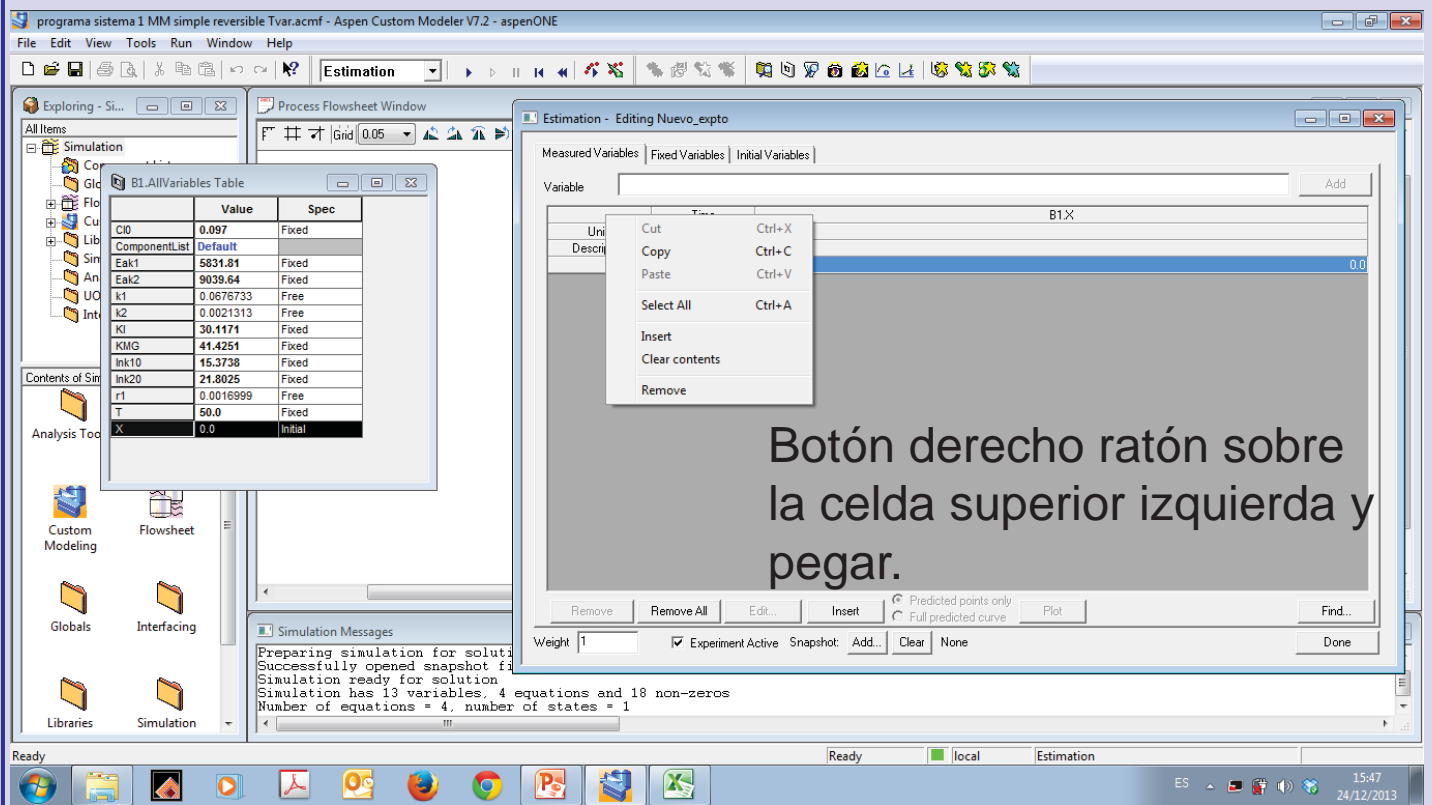
SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



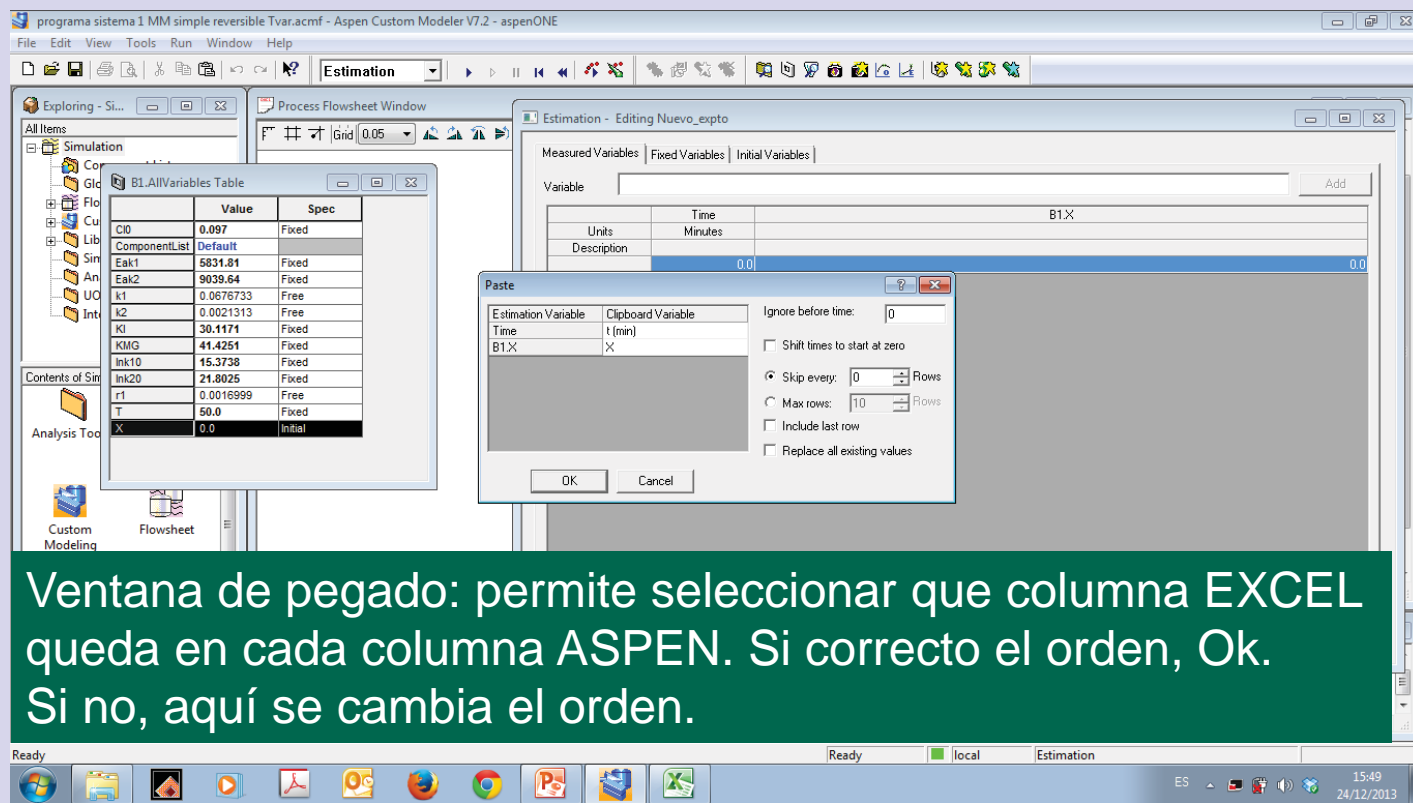
SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'B1.AllVariables Table' is open, displaying a list of variables and their specifications. The 'Paste' dialog box is also open, showing the 'Clipboard Variable' and 'Ignore before time' options. The 'Process Flowsheet Window' is visible in the background.

B1.AllVariables Table

Variable	Value	Spec
C10	0.097	Fixed
ComponentList	Default	
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
K1	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

Paste Dialog Box

Estimation Variable	Clipboard Variable
Time	t (min)
B1.X	X

Ignore before time: 0

☐ Shift times to start at zero

☒ Skip every: 0 Rows

☐ Max rows: 10 Rows

☐ Include last row

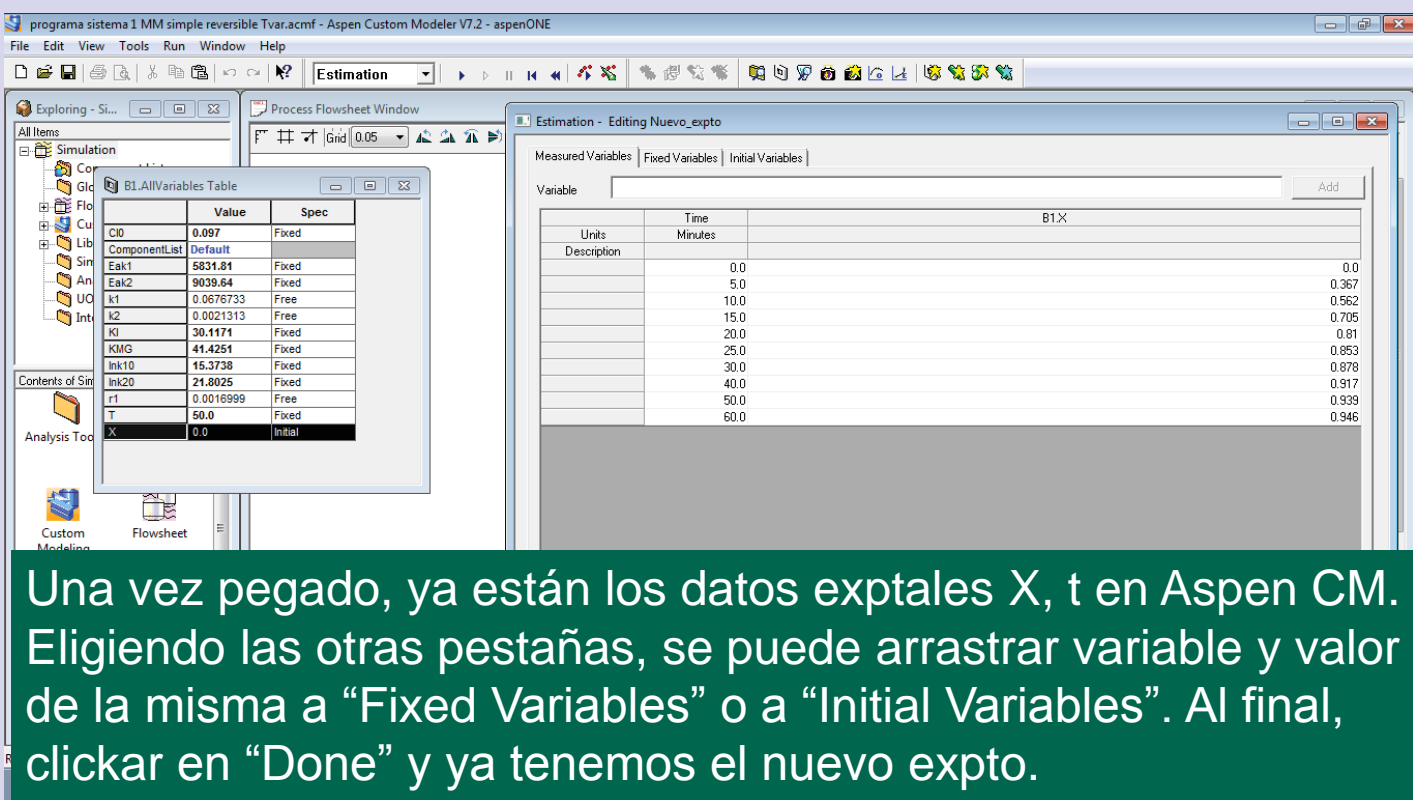
☐ Replace all existing values

OK Cancel

Ventana de pegado: permite seleccionar que columna EXCEL queda en cada columna ASPEN. Si correcto el orden, Ok. Si no, aquí se cambia el orden.

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



The screenshot shows the Aspen Custom Modeler 8.0 interface. The 'B1.AllVariables Table' is open, displaying a list of variables and their specifications. The 'B1.X' data table is also open, showing the time (t) and the corresponding value (X) for the variable X.

B1.AllVariables Table

Variable	Value	Spec
C10	0.097	Fixed
ComponentList	Default	
Eak1	5831.81	Fixed
Eak2	9039.64	Fixed
k1	0.0676733	Free
k2	0.0021313	Free
K1	30.1171	Fixed
KMG	41.4251	Fixed
Ink10	15.3738	Fixed
Ink20	21.8025	Fixed
r1	0.0016999	Free
T	50.0	Fixed
X	0.0	Initial

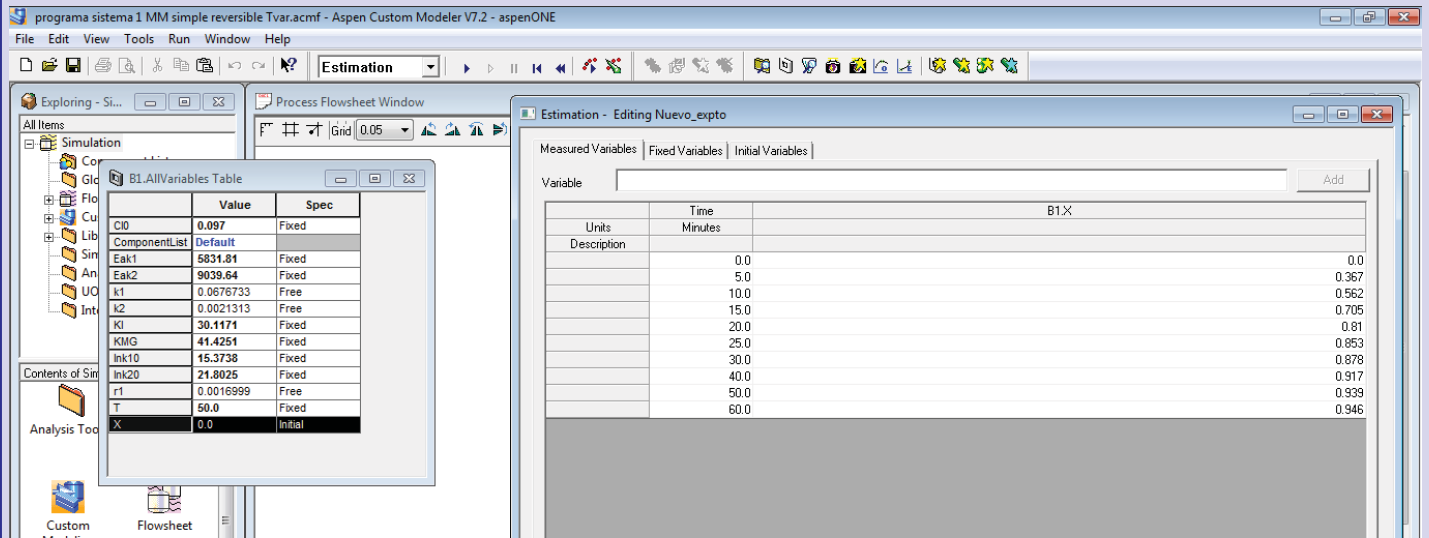
B1.X Data Table

Units	Time	Minutes	B1.X
Description			
	0.0		0.0
	5.0		0.367
	10.0		0.562
	15.0		0.705
	20.0		0.81
	25.0		0.853
	30.0		0.878
	40.0		0.917
	50.0		0.939
	60.0		0.946

Una vez pegado, ya están los datos exptales X, t en Aspen CM. Eligiendo las otras pestañas, se puede arrastrar variable y valor de la misma a "Fixed Variables" o a "Initial Variables". Al final, clickar en "Done" y ya tenemos el nuevo expto.

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

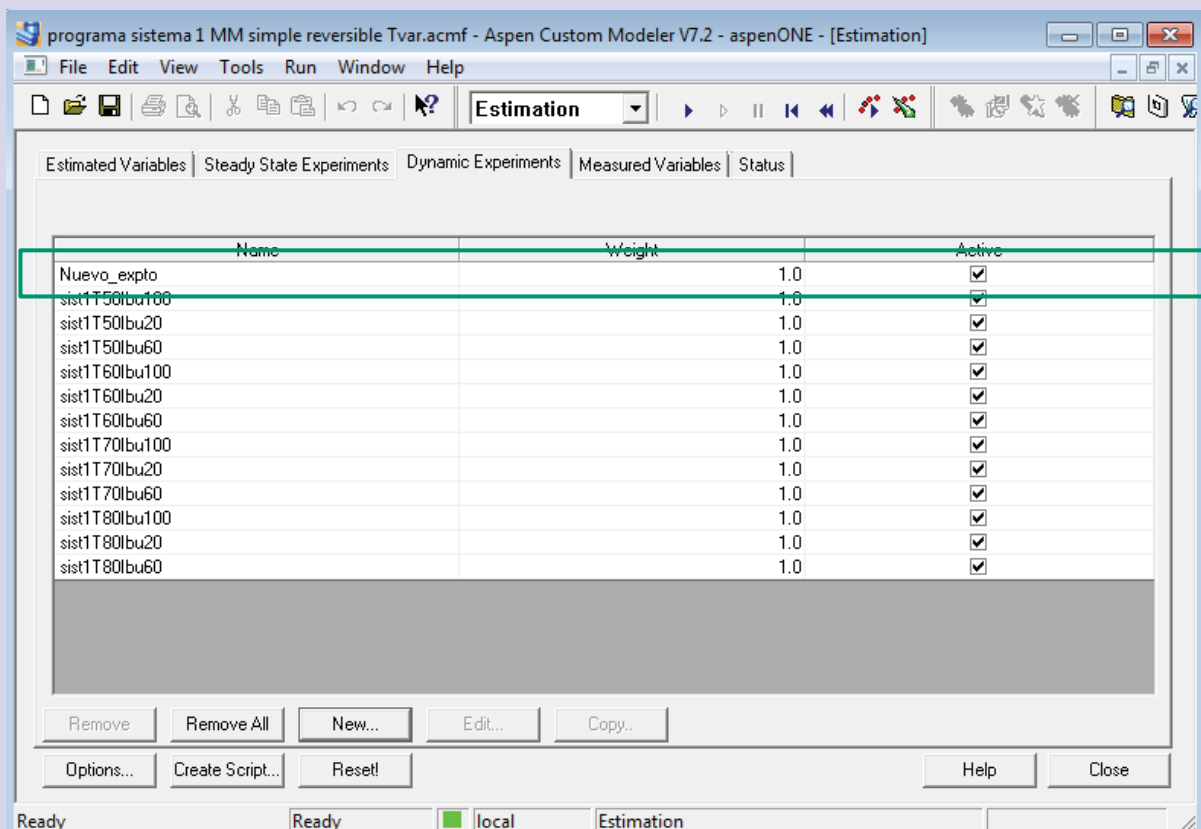
ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



Una vez pegado, ya están los datos exptales X, t en Aspen CM. Eligiendo las otras pestañas, se puede arrastrar variable y valor de la misma a “Fixed Variables” o a “Initial Variables”. Al final, clickar en “Done” y ya tenemos el nuevo expto.

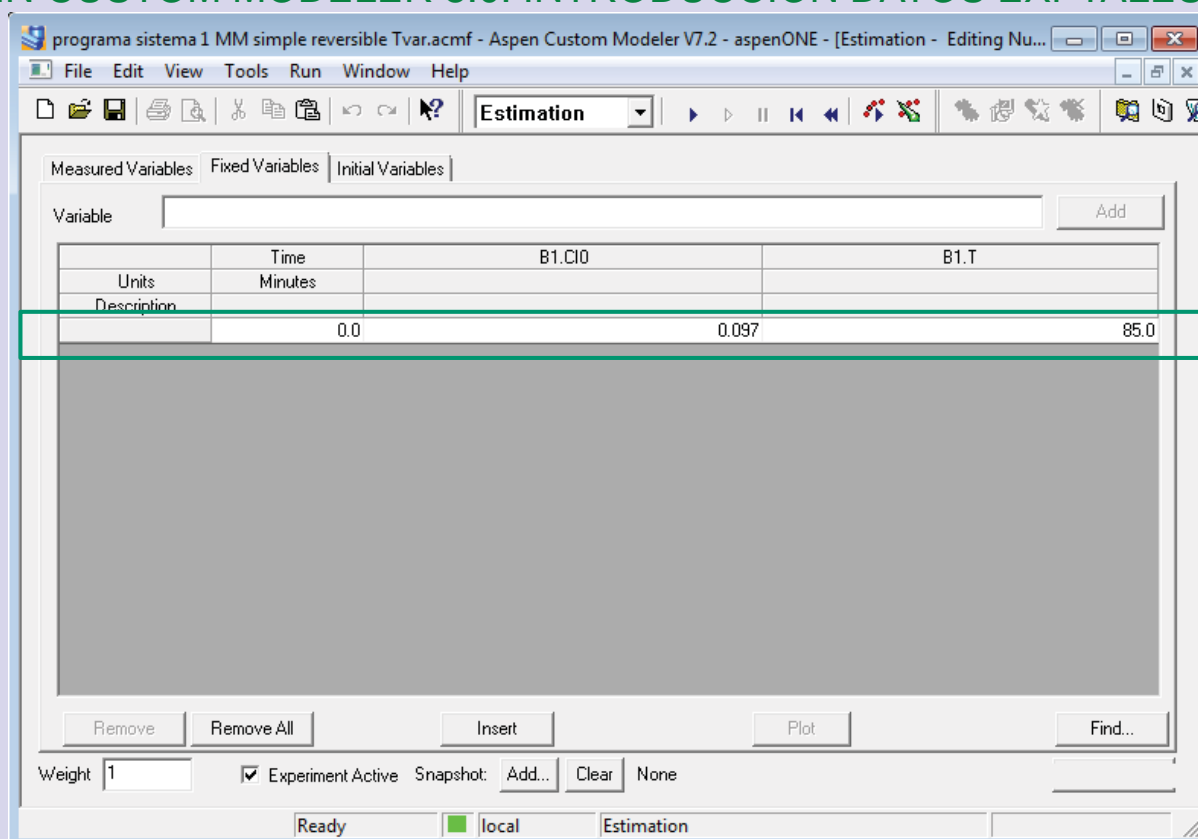
SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



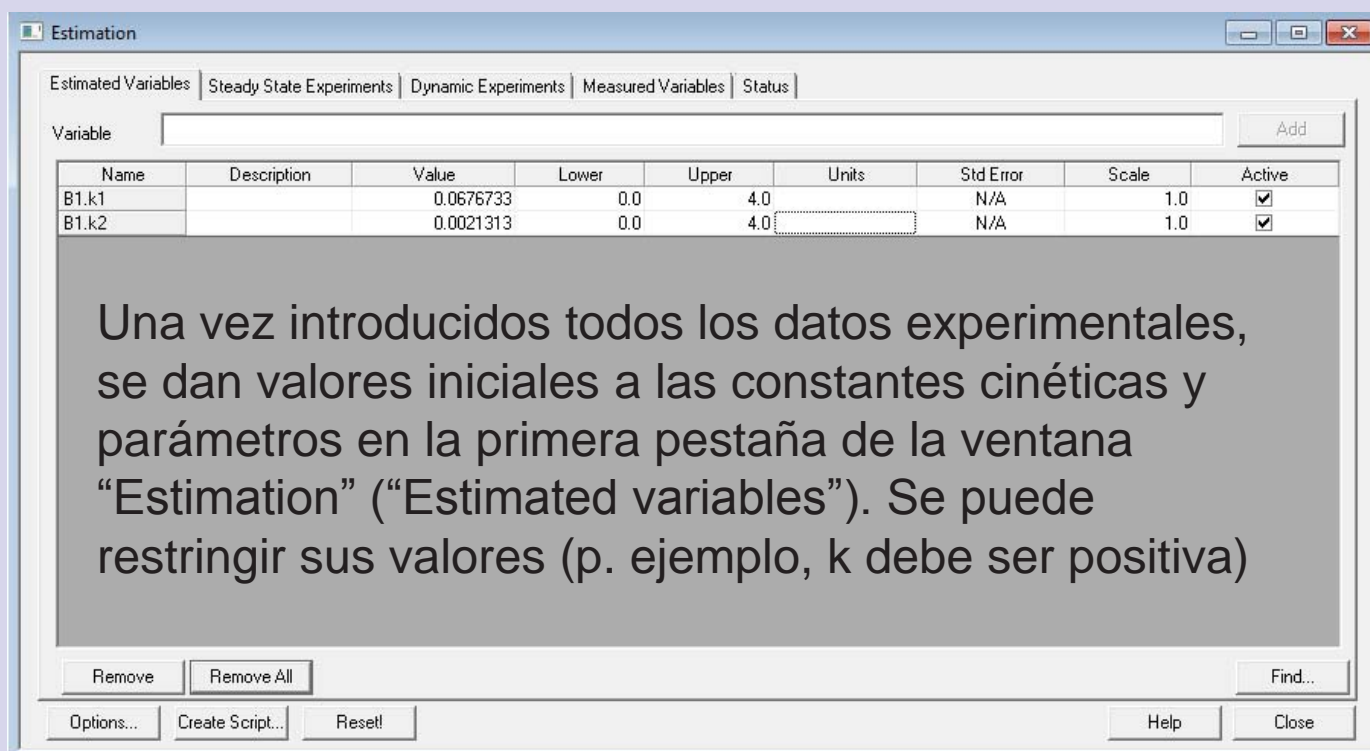
SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: INTRODUCCIÓN DATOS EXPTALES



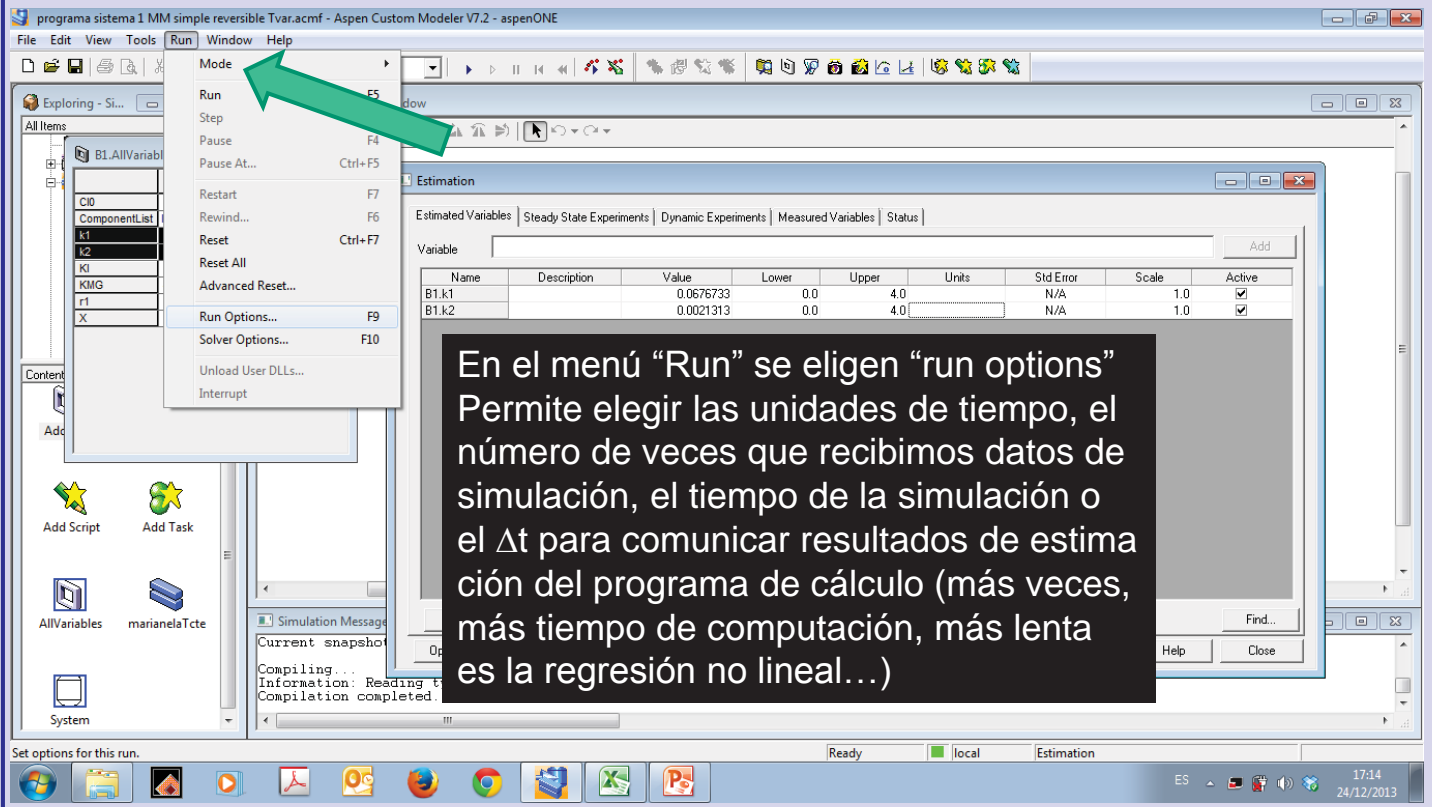
SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS



SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: CONTROL DE LA ESTIMACIÓN

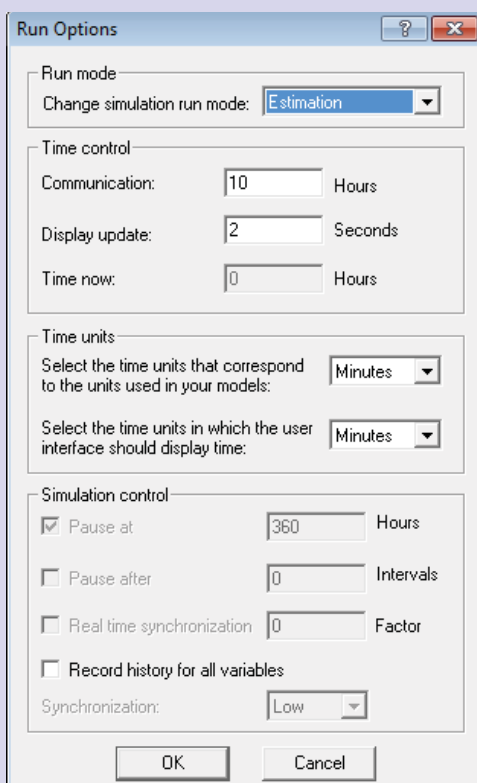


En el menú "Run" se eligen "run options" Permite elegir las unidades de tiempo, el número de veces que recibimos datos de simulación, el tiempo de la simulación o el Δt para comunicar resultados de estimación del programa de cálculo (más veces, más tiempo de computación, más lenta es la regresión no lineal...)

Name	Description	Value	Lower	Upper	Units	Std Error	Scale	Active
B1.k1		0.0676733	0.0	4.0		N/A	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>
B1.k2		0.0021313	0.0	4.0		N/A	1.0	<input checked="" type="checkbox"/>

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: CONTROL DE LA ESTIMACIÓN



Run Options

Run mode
Change simulation run mode: Estimation

Time control
Communication: 10 Hours
Display update: 2 Seconds
Time now: 0 Hours

Time units
Select the time units that correspond to the units used in your models: Minutes
Select the time units in which the user interface should display time: Minutes

Simulation control
☒ Pause at 360 Hours
☐ Pause after 0 Intervals
☐ Real time synchronization 0 Factor
☐ Record history for all variables
Synchronization: Low

OK Cancel

Modo de trabajo de ACM

Intervalo de comunicación de cálculos

Tiempo de inicio simulación/estimación

Unidades de tiempo de cálculo

Unidades de tiempo de gráficas

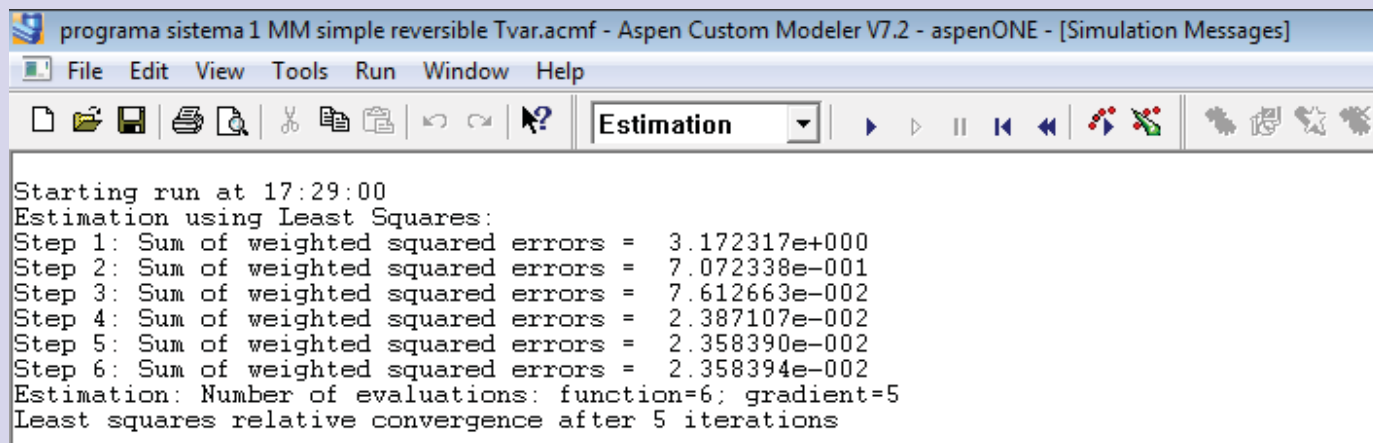
Tiempo al que termina la simulación

Fijadas las condiciones de la estimación o de la simulación, se comienza dando a en la barra de herramientas o a "run" en el menu "Run" o función "F5".

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: VENTANA DE MENSAJES

La estimación procederá hasta que el cambio en la SRC sea tan pequeño como se haya fijado ("Threshold value") en "Simulation Options " (ver menú "Tools"). Se irá viendo como disminuye SRC según se van aproximando los valores de las constantes a sus óptimos siguiendo la regresión no lineal según el método escogido. Al final, una ventana indica el final de las iteraciones.



```
Starting run at 17:29:00
Estimation using Least Squares:
Step 1: Sum of weighted squared errors = 3.172317e+000
Step 2: Sum of weighted squared errors = 7.072338e-001
Step 3: Sum of weighted squared errors = 7.612663e-002
Step 4: Sum of weighted squared errors = 2.387107e-002
Step 5: Sum of weighted squared errors = 2.358390e-002
Step 6: Sum of weighted squared errors = 2.358394e-002
Estimation: Number of evaluations: function=6; gradient=5
Least squares relative convergence after 5 iterations
```

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: VENTANA DE MENSAJES

Aunque ACM puede mostrar los resultados gráficos (se verá en la práctica), es recomendable crear dos archivos *.txt, uno con los valores de las constantes estimadas, F95, SRC... y otro con los resultados del ajuste del experimento (p.ej. ctes.txt y ajuste.txt).

Estimated variables:

	Value	Standard Error	95% Confidence Interval	Name
1	2.845516e-001	6.846370e-003	2.706535e-001, 2.984497e-001	B1.k1
2	1.652652e-002	2.211240e-003	1.203771e-002, 2.101534e-002	B1.k2

Degrees of Freedom=37; RMS Error= 2.459098e-002; F-value= 1.793765e+004

Covariance Matrix:

	1	2
1	4.6873e-005	
2	8.2949e-006	4.8896e-006

Correlation Matrix:

	1	2
1	1.0000e+000	
2	5.4792e-001	1.0000e+000

Ctes.txt

F95

Weighted residual sum of squares	Weighted residual sum	Standard error estimate	Percentage of variation explained	Measured variable name
2.358e-002	3.709e-003	2.525e-002	99.339	B1.X

SÍNTESIS DE PROFÁRMACOS: MONOGLICÉRIDO DE IBUPROFENO

ASPEN CUSTOM MODELER 8.0: VENTANA DE MENSAJES

Luego se pueden abrir con EXCEL como *.txt y fijar la separación entre columnas como “de ancho fijo”, lo que permitirá separar a voluntad las columnas, quedando bien para hacer gráficas en EXCEL u ORIGIN.

Observed versus Predicted:

Ajuste. txt

Time	Observed	Predicted	%Error	Standardized Residual	Absolute Residual
------	----------	-----------	--------	-----------------------	-------------------

Dynamic experiment sist1T80lbu100: (sum of weighted squared errors= 6.686061e-003)

Variable B1.X:

0	0.0000e+000	0.0000e+000	0	0.0000e+000	0.0000e+000
10	1.6500e-001	1.6134e-001	2.3	1.4888e-001	3.6611e-003
20	2.7200e-001	2.8939e-001	-6	-7.0703e-001	-1.7387e-002
30	3.9100e-001	3.9296e-001	-0.5	-7.9561e-002	-1.9565e-003
40	4.9900e-001	4.7787e-001	4.4	8.5940e-001	2.1134e-002
60	6.1900e-001	6.0686e-001	2	4.9377e-001	1.2142e-002
90	7.3000e-001	7.3300e-001	-0.41	-1.2210e-001	-3.0026e-003
120	7.9400e-001	8.1041e-001	-2	-6.6737e-001	-1.6411e-002
150	8.2700e-001	8.5893e-001	-3.7	-1.2983e+000	-3.1927e-002
180	8.4900e-001	8.8977e-001	-4.6	-1.6577e+000	-4.0765e-002
240	8.8800e-001	9.2227e-001	-3.7	-1.3938e+000	-3.4275e-002
300	9.0500e-001	9.3578e-001	-3.3	-1.2516e+000	-3.0777e-002
360	9.1500e-001	9.4129e-001	-2.8	-1.0689e+000	-2.6286e-002

ANEXO 4

GUIONES DE PRÁCTICAS

- **Reloj de formaldehído**
- **Reloj de iodo**
- **Hidrólisis de ONPG**
- **Cuaderno de laboratorio**

GUIÓN PARA ALUMNOS

RELOJ DE FORMALDEHIDO

Objetivos:

1. Definir la cinética química.
2. Obtener datos suficientes para conseguir un modelo matemático válido en el programa Aspen.
3. Evaluar la influencia de la concentración de un reactivo y la temperatura en la velocidad de la reacción química, mediante la determinación del orden de reacción respecto al reactivo limitante.
4. Determinar el mejor indicador

Fundamento:

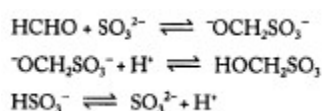
Las reacciones de tipo reloj permiten detectar de forma visual el tiempo necesario para consumir una cantidad de uno de los reactivos de la reacción principal. Este tiempo está influenciado por las concentraciones de los reactivos, la temperatura y los catalizadores.

En el laboratorio se va a realizar una serie de experimentos en los cuales se van a determinar el tiempo necesario para que se desarrolle la reacción. Estos tiempos luego se utilizarán para calcular los órdenes de reacción experimentales. Cabe destacar que el tiempo de reacción está inversamente relacionado con su velocidad (mayor tiempo \Rightarrow menor velocidad).

Mediante el cambio de color que presentan las reacciones de tipo reloj se va a determinar la influencia de la concentración de un reactivo en la velocidad de una reacción mediante la obtención del orden de reacción respecto del reactivo. La influencia de la temperatura será determinada mediante el cálculo de la energía de activación.

En el reloj de formaldehído sucede lo siguiente:

El formaldehído reacciona con el sulfito produciendo un intermediario que en medio ácido forma el sulfonato de hidroximetano.



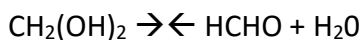
El medio ácido es proporcionado por el equilibrio bisulfito-sulfito

Al disminuir la concentración de sulfito de sodio anhidro (especie atacante del formaldehído), el equilibrio bisulfito-sulfito se desplaza hacia la derecha (la de HSO_3^-), produciendo sulfito y H^+ , este último neutraliza al intermediario (la que está en medio).

Cuando la concentración de H^+ disminuye, el intermediario es neutralizado con protones del agua y, como consecuencia, el pH de la disolución se eleva provocando el cambio de color.



El formaldehído en medio acuoso presenta un equilibrio con el metilenglicol. Esta deshidratación es el paso que controla la velocidad de la reacción:



Para conocer cómo influyen las concentraciones en el tiempo que tarda la reacción, se pueden realizar varias mediciones manteniendo constante el volumen añadido de la disolución 2 y variando en cada prueba el volumen de la disolución 3. Después se mantiene constante el volumen de la disolución 3 y se varía el de la disolución 2. De esta manera se construye una tabla de mililitros agregados.

BISULFITO (disolución 2)		FORMALDEHIDO (disolución 3)		TIEMPO
Volumen (mL)	Concentración (x 10 ⁻³ M)	Volumen (mL)	Concentración (x 10 ⁻³ M)	(segundos)
5	2.23	5	1.41	42
5	2.23	10	2.82	20
5	2.23	15	4.23	13
5	2.23	20	5.64	10
5	2.23	25	7.05	8
5	2.23	30	8.46	6
0.625	0.28	5	1.41	4
1.25	0.56	5	1.41	8
2.5	1.12	5	1.41	18
5	2.23	5	1.41	42
10	4.46	5	1.41	94
15	6.69	5	1.41	154
20	8.92	5	1.41	231
25	11.2	5	1.41	385

Propuesta de volúmenes agregados

Bibliográficamente se encontró que la reacción es de primer orden con respecto al formaldehído y de orden -1 con respecto al bisulfito. Si se utiliza p-nitrofenol con fenoftaleína hay un cambio de incoloro a oro, para finalizar en violeta. El indicador de timoftaleína y p-nitrofenol se obtiene un cambio de color de oro a verde (prop: 2tímo, 3pnitro).

Reactivos:

Solución bisulfito: Agua destilada, bisulfito de sodio, sulfito de sodio anhidro, sal tetrasódica del EDTA.

Solución de formaldehído: formaldehído.

Indicadores: p-nitrofenol con fenoftaleína; timoftaleína y p-nitrofenol.

Procedimiento experimental:

- Disolución 1 (indicador): 1g de fenoftaleína disuelto en una mezcla de 50% etanol-agua destilada. (EN100ML DE ETANOL-AGUA 100MG DE FENOFTALEINA)
- Disolución 2: Un litro de agua destilada que contiene 18 g de bisulfito de sodio (NaHSO₃) y 1.6 g de sulfato de sodio anhidro (Na₂SO₄) lo que da un cociente molar [bisulfito]/[sulfato] igual a 11.25 además de 3.7g de etilendiaminotetracetato

(EDTA). (100ml de agua más 1,8 g de bisulfito y 0,16 g de sulfato más 0,37g de EDTA)

- Disolución 3: 90 mL de una disolución al 37% de formaldehído aforados a un litro de disolución con agua destilada. (7.3 ml de la disolución aforado en 92.3 ml de agua destilada)

El experimento se realiza colocando 20 mL de agua en dos recipientes. En el primero de ellos se agrega 0,1 mL de la disolución (1) más 0,5 mL de la disolución (2), y en el segundo se agregan 0,5 mL de la disolución 3. El contenido de estos dos recipientes se mezcla en un tercero de capacidad suficiente y se inicia el conteo del tiempo hasta que la disolución cambie de incoloro a rosa.

Tabla 1. Volúmenes de reactivos, manteniendo la concentración de bisulfito constante.

No. tubo	solución 1		agua	solución 2		tiempo (seg)	
	volumen (mL)	M (mol/L)	volumen (mL)	volumen (mL)	M (mol/L)		
1	2.5		7.00	0.50			
2	2.5		6.75	0.75			
3	2.5		6.50	1.00			
4	2.5		6.00	1.50			
5	2.5		5.50	2.00			
6	2.5		5.00	2.50			

Tabla 2. Volúmenes de reactivos, manteniendo la concentración de formaldehído constante.

No. tubo	solución 1		agua	solución 2		Tiempo (seg)	
	volumen (mL)	M (mol/L)	volumen (mL)	volumen (mL)	M (mol/L)		
7	0.50		8.25	1.25			
8	0.75		8.00	1.25			
9	1.25		7.50	1.25			
10	2.50		6.25	1.25			
11	3.75		5.00	1.25			
12	5.00		3.75	1.25			
13	6.25		2.5	1.25			

Cuestiones:

1. ¿Qué influencia tiene la concentración de formaldehído en la RQ?
2. ¿Qué influencia tiene la concentración de bisulfito en la RQ?
3. ¿Qué influencia tiene la temperatura?
4. ¿Qué factores debemos controlar para cubrir los objetivos?

Bibliografía:

Francisco Torres, Guadalupe Mariana y otros, *Manual para Laboratorio de Fisicoquímica*, Instituto politécnico nacional unidad profesional interdisciplinaria de biotecnología.

Fernando Cortés, Andori Garritz, Glinda Irazoque y Vicente Talanquer, *La química y el tiempo. Reacciones reloj*, Instituto nacional.

GUIÓN PARA ALUMNOS

RELOJ DE YODO CON ÁCIDO ASCÓRBICO

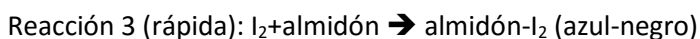
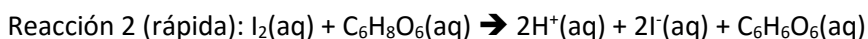
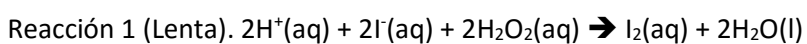
Objetivos:

1. Definir la cinética química de una reacción cuyo mecanismo consta de tres etapas.
2. Obtener datos suficientes para conseguir un modelo matemático válido.
3. Evaluar la influencia de la concentración de los reactivos en la velocidad de la reacción química, mediante la determinación del orden de reacción respecto al reactivo limitante.

Fundamento:

Las reacciones con período de inducción o reacciones reloj son aquellas en que después de ser activadas, hay un período de inducción en que la reacción parece que no se lleva a cabo y al término del cual se produce un cambio repentino que manifiesta que ha ocurrido la reacción.

El mecanismo de estas reacciones puede separarse en tres etapas, que en el caso de la reacción de reloj de yodo con vitamina C son las siguientes:



En este caso la manifestación de la reacción es un cambio de color de incoloro a negro azulado. El estudio del tiempo al que sucede dicho cambio cuando se varía la concentración de vitamina C, de peróxido de hidrógeno y de yoduro potásico permitirá establecer orden de reacción respecto de cada reactivo.

Bibliográficamente se encontró que la reacción global es más lenta cuanto mayor es la concentración de vitamina C y que es más rápida al aumentar la concentración de yoduro.

La Reacción 1 es la etapa controlante y determina la velocidad del proceso. sin embargo, el ácido ascórbico es el reactivo limitante y la reacción 3 no se dará hasta que no se consuma este reactivo..

La Reacción 2 es muy rápida y compite con la reacción 3 de forma que impide la aparición del complejo almidón-yodo de color azul.

El tiempo en el que la disolución cambia de incolora a azul-negra depende de varios factores:

- Concentración inicial de yoduro y de peróxido (la producción de yodo en la reacción 1 será más rápida cuanto mayores sean dichas concentraciones)

- Concentración de ácido ascórbico, ya que ha de consumirse en la reacción 2 antes de que se produzca la reacción 3.
- Temperatura. La velocidad global del proceso aumenta con la temperatura al hacerlo la constante cinética de la reacción 1.

Reactivos:

Materiales y Reactivos:

- Vitamina C sólida ($C_6H_8O_6$)
- Yoduro potásico sólido (KI)
- Peróxido de hidrógeno 6% m/v (H_2O_2)
- Cronómetros
- 2 vidrios de reloj
- 3 vasos de precipitado de 50 mL
- Dos vasos de precipitado de 100 mL
- Dos pipetas de 10 mL
- Una pipeta de 5 mL
- 3 matraces aforados de 250 mL
- Espectrofotómetro UV Varian Cary-E1

Procedimiento experimental:

Preparación de disoluciones:

- Disolución de KI: pesar 4.5g de KI y se diluir en 250 mL de agua destilada.
- Disolución de H_2O_2 : calcular la cantidad de peróxido de hidrogeno al 6% necesaria para obtener una disolución de 250 mL a 0.294M, introducirla en un matraz aforado de 250 mL y enrasar.
- Disolución de vitamina C Disolver 4 g de ácido ascórbico en 250 mL de agua destilada, se debe tomar en cuenta que la vitamina C en disolución pierde sus propiedades con el tiempo por lo que se debe usar rápidamente después de su preparación.

Una vez preparadas las tres disoluciones se mezclan en un vaso de precipitados de 100 mL primero 10 mL de la disolución de vitamina C con 14mL de la disolución de KI y por último se añaden 30 mL de la de peróxido a la cual se le añadió previamente 1 g de almidón, obteniendo un volumen final de 54 mL. Empezar a cronometrar el tiempo justo cuando se añada la tercera disolución hasta observar el cambio de color.

Repetir el mismo experimento pero disminuyendo las concentraciones de los reactivos pero sin variar el volumen final de la disolución para estudiar el efecto de la concentración en el tiempo de reacción. Para ello se variará el volumen de disolución de vitamina C desde 1 hasta 9 mL completando con agua destilada el volumen total hasta 54 mL. Recoger los resultados en forma de tabla: Concentración de ácido ascórbico vs tiempo.

Repetir todo el procedimiento variando el volumen de KI, recoger los datos en una tabla.

Estudiar la cantidad mínima de almidón necesaria para la reacción, realizando el ensayo con cantidades decrecientes de almidón y midiendo la absorbancia en un espectrofotómetro UV.

Cuestiones:

1. ¿Qué influencia tiene la concentración de ácido ascórbico en la RQ?
2. ¿Qué influencia tiene la concentración de KI en la RQ?
3. ¿Qué factores debemos controlar para cubrir los objetivos?

Bibliografía:

C. D. Torres, M. L. A. Muñoz. Reacciones encadenadas: del reloj de yodo al arco iris químico. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias* (2011) 8 (1), 105-110.

M^a L. Aguilar Muñoz, C. Durán Torres. Química recreativa con agua oxigenada. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*, 8 (Núm. Extraordinario), 446-453, 2011

Fernando Cortés, Andori Garritz, Glinda Irazoque y Vicente Talanquer, *La química y el tiempo. Reacciones reloj*, Instituto nacional.

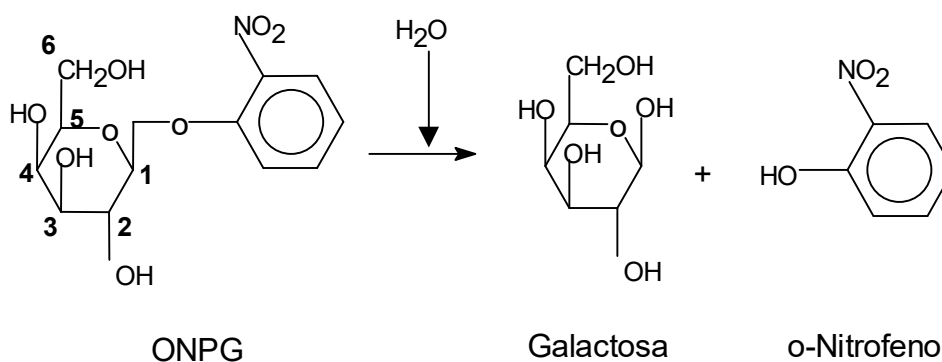
LABORATORIO de CINÉTICA ENZIMÁTICA

HIDRÓLISIS de ONPG con β -GALACTOSIDASA de *Aspergillus niger*

GUIÓN PARA ALUMNOS

REACCIÓN a ESTUDIAR

En esta práctica se aborda el estudio cinético de una reacción enzimática. La actividad de la enzima (una β -galactosidasa producida por el hongo *Aspergillus niger*) se determina usando el sustrato sintético ONPG (o-nitrofenol- β -D-galactopiranosido). El ONP (o-nitrofenol), producido al hidrolizar la enzima el ONPG, da coloración amarilla a pH neutro o básico, siendo la absorbancia a 420 nm proporcional a la concentración de producto.



OBJETIVOS

- Obtención de datos cinéticos: equipos, condiciones de experimentación, variables: concentración del sustrato.
- Métodos de análisis: técnicas lineal y no lineal.
- Aplicación de los métodos diferencial e integral.

PROGRAMACIÓN

Primera jornada: Experimentación.

Segunda jornada: Cálculo en el aula de informática con Origin 7.5.

PROCEDIMIENTO

La instalación experimental que se va a utilizar para determinar el modelo cinético de la hidrólisis del ONPG consiste en varios matraces erlenmeyer usados como reactores discontinuos, sumergidos en un baño termostático (operación isoterma) con agitación de vaivén. El medio de reacción es un tampón fosfato 0,05 M pH 7,2 que contiene $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (1 mM) y 2-mercaptoetanol (5 mM). Llamamos a este tampón BP en lo sucesivo.

REACTIVOS

H_2SO_4 0,5 M, Na_2CO_3 1 M, BP, solución de ONPG de concentración adecuada en BP, solución de enzima 5000 mg/L en BP (preparada por disolución de 50 mg de un liofilizado en 10 mL de tampón BP).

MÉTODO

- 1) Cada grupo experimenta a una solución inicial de ONPG distinta, haciendo el experimento por duplicado.
- 2) En un vaso de precipitados, se preparan inicialmente 300 mL de ONPG 0,5 g/L disuelto en tampón BP. Esta será la concentración a la que trabaje uno de los grupos, mientras que los demás trabajarán con disoluciones del sustrato diluidas a partir de esta disolución madre: a 0,3, 0,2 y 0,1 g/L.
- 3) Diluyendo con tampón BP cuando sea preciso, se preparan dos erlenmeyer con 50 mL cada uno del medio de reacción con la concentración elegida del sustrato.
- 4) Se atemperan las disoluciones a 40°C en un baño de vaivén con la agitación fijada en 100 r.p.m.
- 5) Por cada erlenmeyer se preparan 12 tubos de ensayo con 1 mL de ácido sulfúrico 0,5 M y 0,5 mL de tampón BP.
- 6) Añadir 0,5 mL de la solución de enzima en BP en cada erlenmeyer (CE final=50 mg/L). Tiempo CERO. No se toma muestra.
- 7) Tomar muestras de 1 mL cada 3 minutos en el experimento con 0,5 g/L de ONPG y cada 2 minutos para los otros experimentos. Añadir las en los tubos previamente preparados.
- 8) Al finalizar el experimento, añadir a cada tubo de ensayo con muestra 1,5 mL de Na_2CO_3 1 M. Medir la absorbancia de las muestras en el colorímetro a $\lambda = 420$ nm.

DATOS EXPERIMENTALES

T= 40°C; C_{ONPG} = g/L; C_{enzima}=50 mg/L; pH=7,0; V_r = 50 ml

t (min)							
Abs₄₂₀							
C_{ONP} (g/L)							

t (min)					
Abs₄₂₀					
C_{ONP} (g/L)					

T= 40°C; C_{ONPG} = g/L; C_{enzima}=50 mg/L; pH=7,0; V_r = 50 ml

t (min)							
Abs₄₂₀							
C_{ONP} (g/L)							

t (min)					
Abs₄₂₀					
C_{ONP} (g/L)					

CÁLCULOS

Para calcular la concentración de ONP en las muestras, y por tanto la conversión de ONPG, hay que hacer uso de la siguiente ecuación:

$$C_{\text{onp}} \text{ (g/L)} = 0,024 \text{ (Abs}_{420}) \quad (1)$$

factor de dilución: 4

p.m. ONP=139 g/mol; p.m. ONPG=304 g/mol

Para la determinación del modelo cinético, se puede asumir que sigue la ecuación tipo Michaelis-Menten, sin inhibición o con inhibición competitiva:

$$\mu = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{\mu'_{\text{max}} \cdot C_E \cdot C_A}{K_M + C_A} \quad (2)$$

$$\mu = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{\mu'_{\text{max}} \cdot C_E \cdot C_A}{K_M \left(1 + \frac{C_{A0} - C_A}{K_I} \right) + C_A} \quad (3)$$

Estas ecuaciones pueden utilizarse en forma integrada o diferencial. En este último caso es necesario derivar previamente las curvas C_A vs. t para obtener la velocidad, ajustando a un polinomio u otra función fácil de derivar.

Para determinar si hay inhibición competitiva por algún producto se puede representar la velocidad frente al cociente entre la concentración del sustrato y del producto. En este caso, al ser la reacción equimolecular:

$$\mu = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{\mu'_{\text{max}} \cdot C_E \cdot \frac{C_A}{C_{A0} - C_A}}{K + \frac{C_A}{C_{A0} - C_A}} \quad (4)$$

Que también se puede escribir así:

$$\mu = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{\mu'_{\text{max}} \cdot C_E \cdot C_A}{K \cdot (C_{A0} - C_A) + C_A} \quad (4)$$

Donde K es el cociente entre la constante de Michaelis-Menten, K_M , y la de inhibición, K_I . Este modelo implica saturación de la enzima con el sustrato (orden cero) e inhibición competitiva por algún producto. Se puede utilizar para conocer el valor de la constante cinética μ'_{max} . Admite integración analítica y linealización similares a la del modelo simple de Michaelis-Menten. El modelo de inhibición competitiva clásico, en una ecuación similar, es:

$$\mu = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{\mu'_{\text{max}} \cdot C_E \cdot C_A}{K_M + K \cdot (C_{A0} - C_A) + C_A} \quad (5)$$

Modelo de Michaelis-Menten simple. Método diferencial: linealizaciones.

1) *Linealización de Lineweaver-Burk*

$$\frac{C_E}{\mu} = \frac{K}{\mu'_{\max}} \cdot \frac{1}{C_A} + \frac{1}{\mu'_{\max}} \quad (6)$$

2) *Linealización de Hanes*

$$\frac{C_E \cdot C_A}{\mu} = \frac{K_M}{\mu'_{\max}} + \frac{1}{\mu'_{\max}} \cdot C_A \quad (7)$$

3) *Linealización de Eadie*

$$\frac{\mu}{C_E} = \mu'_{\max} - K_M \frac{\mu}{C_E \cdot C_A} \quad (8)$$

Modelo de Michaelis-Menten simple. Método integral.

$$t = \frac{K_M}{\mu'_{\max} \cdot C_E} \cdot \ln\left(\frac{C_{A0}}{C_A}\right) + \frac{1}{\mu'_{\max} \cdot C_E} \cdot (C_{A0} - C_A) \quad (9)$$

Modelo orden cero-inhibición competitiva. Método diferencial: linealización.

$$\frac{C_A \cdot C_E}{\mu} = \frac{K \cdot C_{A0}}{\mu'_{\max}} + \left(\frac{1-K}{\mu'_{\max}}\right) \cdot C_A \quad (10)$$

Modelo orden cero-inhibición competitiva. Método integral.

$$t = \frac{K \cdot C_{A0}}{\mu'_{\max} \cdot C_E} \cdot \ln\left(\frac{C_{A0}}{C_A}\right) + \left(\frac{1-K}{\mu'_{\max} \cdot C_E}\right) \cdot (C_{A0} - C_A) \quad (11)$$

El criterio para decidir que parámetros son los óptimos es la suma de residuos al cuadrado, que ha de ser lo menor posible y es distinta para método diferencial y para el integral. Para N datos experimentales:

$$SRC_{\text{diferencial}} = \sum_{j=1}^N (\mu_{\text{exptal}} - \mu_{\text{calculada}})^2 \quad (12)$$

$$SRC_{\text{integral}} = \sum_{j=1}^N (t_{\text{exptal}} - t_{\text{calculado}})^2 \quad (13)$$

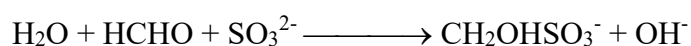
Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:

A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Chemicals: Solution A: 0.3 M formaldehyde (HCHO), (135 cm³)
Solution B: 0.2 M sodium hydrogen sulphite (NaHSO₃) + 0.05 M sodium sulphite (Na₂SO₃) + phenolphthalein, (120 cm³)
Distilled water.

Apparatus: 10 cm³ measuring cylinder, (1)
25 cm³ measuring cylinders, (1)
boiling tubes, (2)
0-100°C thermometer,
stop-watch,
glass rod,
water-bath.

Principle: When equal amounts of solutions A and B are mixed and various amounts of water added to the mixture, the following reaction occurs:



Overall, hydrogen sulphite ion is consumed and once it drops below a certain concentration the pH rises sharply ($\because \text{OH}^- \uparrow$) and as a consequence, the solution turns pink. By measuring the time taken for the turning colour of the solution under different conditions, factors which determine the rate of the reaction can thus be studied.

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name: _____

Seat No.: _____

Date: _____

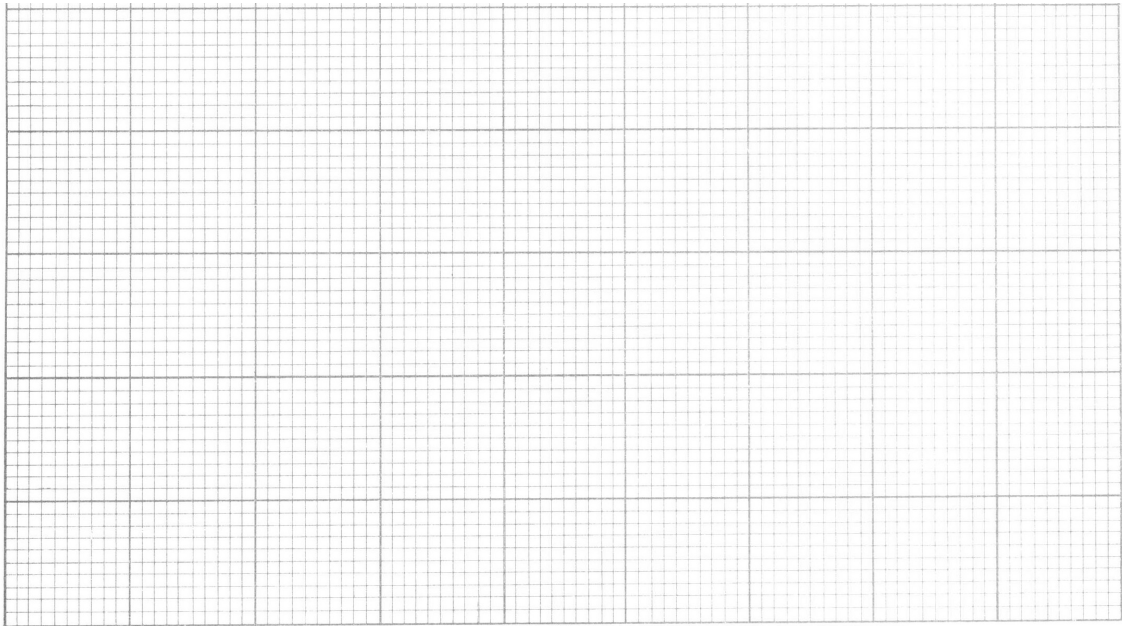
Grade: _____

A. Effect of dilution

- a. Mix the following amounts of water with 5 cm³ of solution A, then add 5 cm³ of solution B and stir vigorously. Record the time for the colour to form. Use measuring cylinders for all measurements.

Vol.of water(cm ³)	0	2.5	5	7.5	10	12.5	15
Time (sec)							

- b. Plot a graph of volume of water against time.



- c. What effect does water have on the rate of the reaction as indicated in your graph?

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name:_____

Seat No.:_____

Date:_____

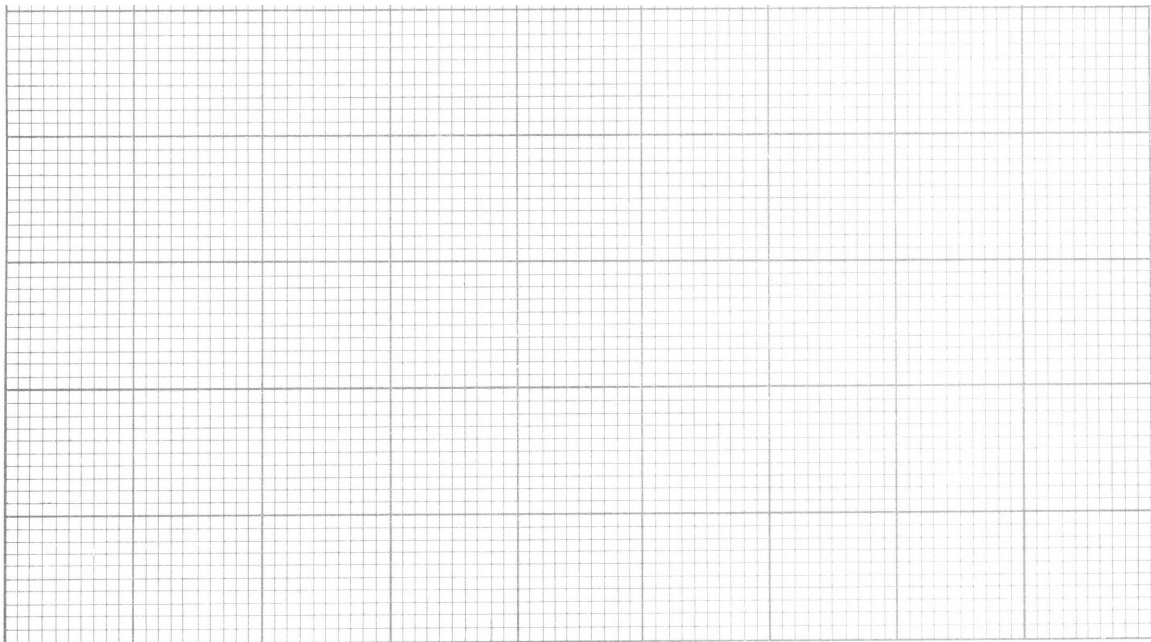
Grade:_____

B. Effect of increasing formaldehyde concentration

- a. Mix the given amounts of solution A and water as listed in the table below and then add 5 cm³ of solution B. Record the time taken for the solution to turn pink.

Vol. of solution A (cm ³)	5	7.5	10	12.5	15
Vol. of water (cm ³)	15	12.5	10	7.5	5
Time (sec)					

- b. Plot a graph of volume of formaldehyde against time.



- c. From your graph, what effect does formaldehyde have on the rate of the reaction.

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name:_____

Seat No.:_____

Date:_____

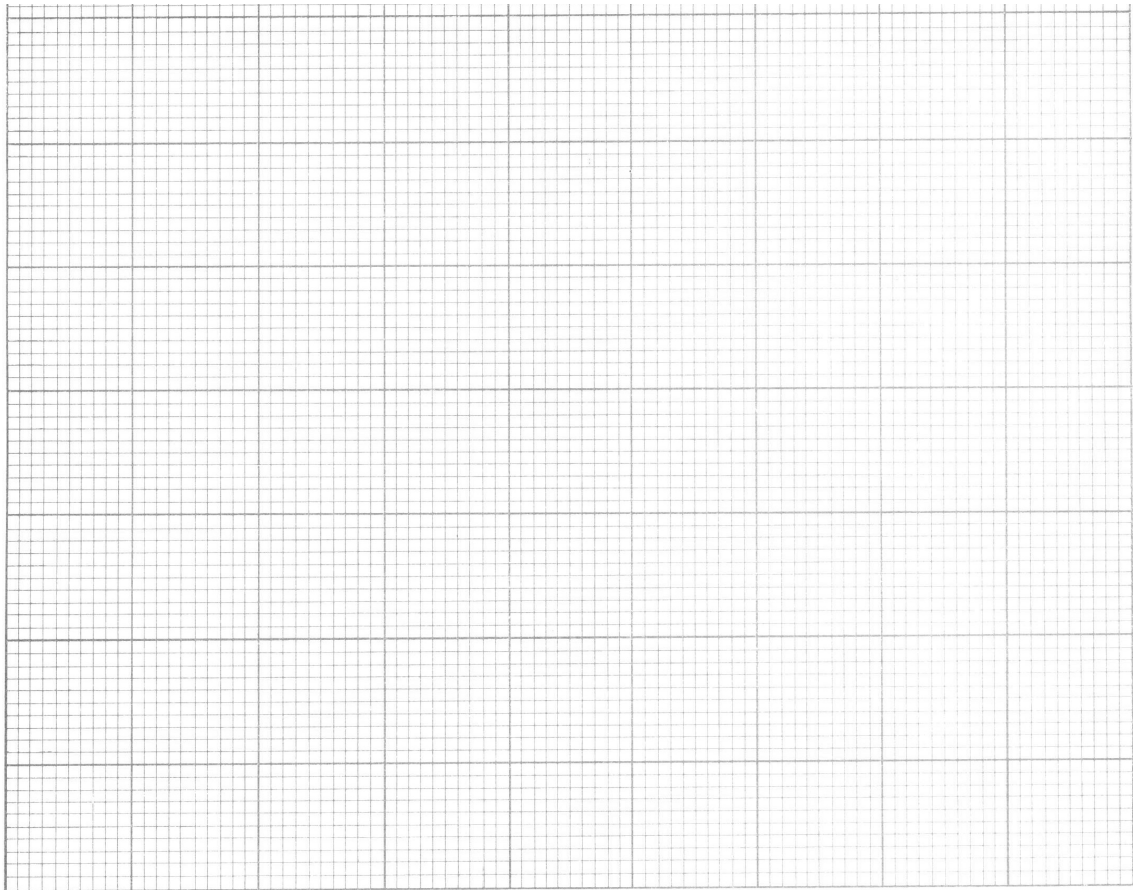
Grade:_____

C. Effect of temperature

- a. Heat 20 cm³ of water and 10 cm³ of solution A to approximately the following temperatures. Add 10 cm³ of solution B and record the maximum temperature of the solution attained and the time taken for it to turn pink.

Approx. temp. (°C)	15	20	25	30	35	40
Max. temp. attained (°C)						
Time (sec/min)						

- b. Plot a graph of temperature against time.



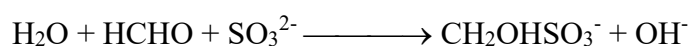
- c. From your graph, find the effect of temperature on the rate of the reaction.

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction: A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Chemicals: Solution A: 0.3 M formaldehyde (HCHO), (135 cm³)
Solution B: 0.2 M sodium hydrogen sulphite (NaHSO₃) + 0.05 M sodium sulphite (Na₂SO₃) + phenolphthalein, (120 cm³)
Distilled water.

Apparatus: 10 cm³ measuring cylinder, (1)
25 cm³ measuring cylinders, (1)
boiling tubes, (2)
0-100°C thermometer,
stop-watch,
glass rod,
water-bath.

Principle: When equal amounts of solutions A and B are mixed and various amounts of water added to the mixture, the following reaction occurs:



Overall, hydrogen sulphite ion is consumed and once it drops below a certain concentration the pH rises sharply ($\because \text{OH}^- \uparrow$) and as a consequence, the solution turns pink. By measuring the time taken for the turning colour of the solution under different conditions, factors which determine the rate of the reaction can thus be studied.

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name: _____

Seat No.: _____

Date: _____

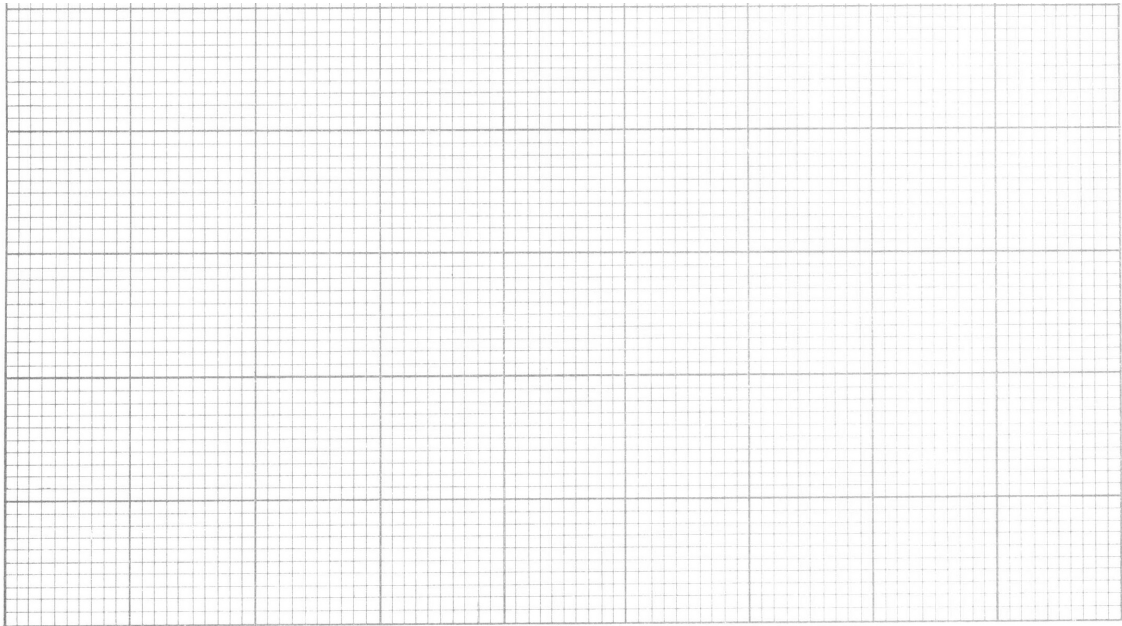
Grade: _____

A. Effect of dilution

- a. Mix the following amounts of water with 5 cm³ of solution A, then add 5 cm³ of solution B and stir vigorously. Record the time for the colour to form. Use measuring cylinders for all measurements.

Vol.of water(cm ³)	0	2.5	5	7.5	10	12.5	15
Time (sec)							

- b. Plot a graph of volume of water against time.



- c. What effect does water have on the rate of the reaction as indicated in your graph?

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name: _____
Seat No.: _____
Date: _____

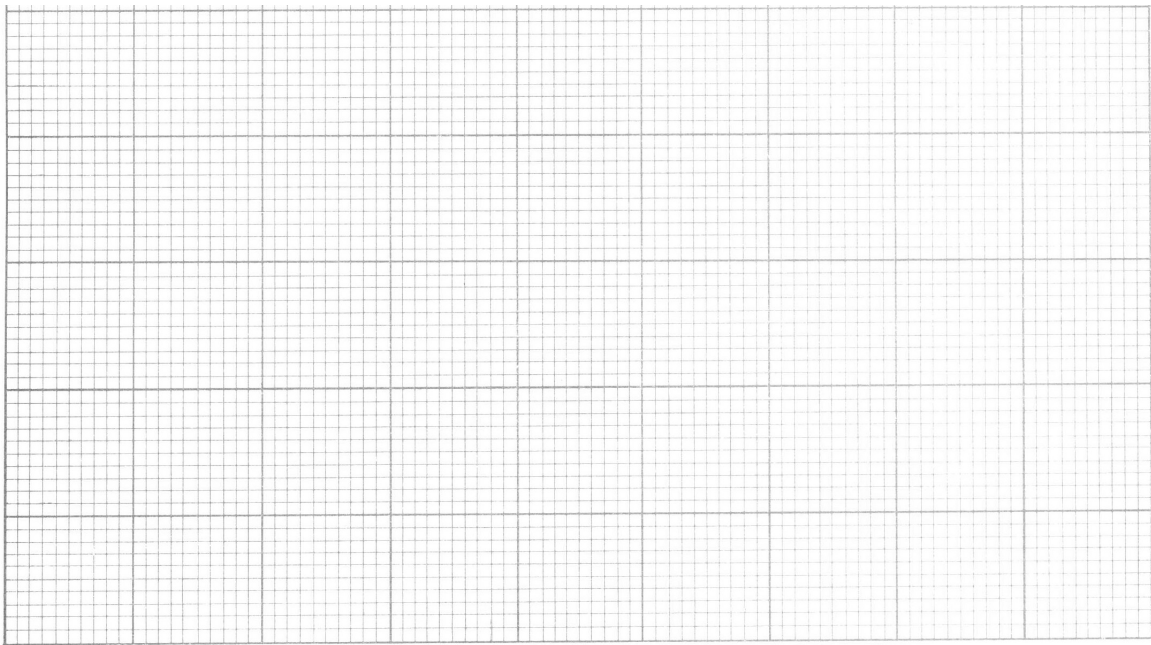
Grade: _____

B. Effect of increasing formaldehyde concentration

- a. Mix the given amounts of solution A and water as listed in the table below and then add 5 cm³ of solution B. Record the time taken for the solution to turn pink.

Vol. of solution A (cm ³)	5	7.5	10	12.5	15
Vol. of water (cm ³)	15	12.5	10	7.5	5
Time (sec)					

- b. Plot a graph of volume of formaldehyde against time.



- c. From your graph, what effect does formaldehyde have on the rate of the reaction.

Experiment P05 The formaldehyde clock reaction:
A study of factors affecting the rate of a chemical reaction

Name:_____

Seat No.:_____

Date:_____

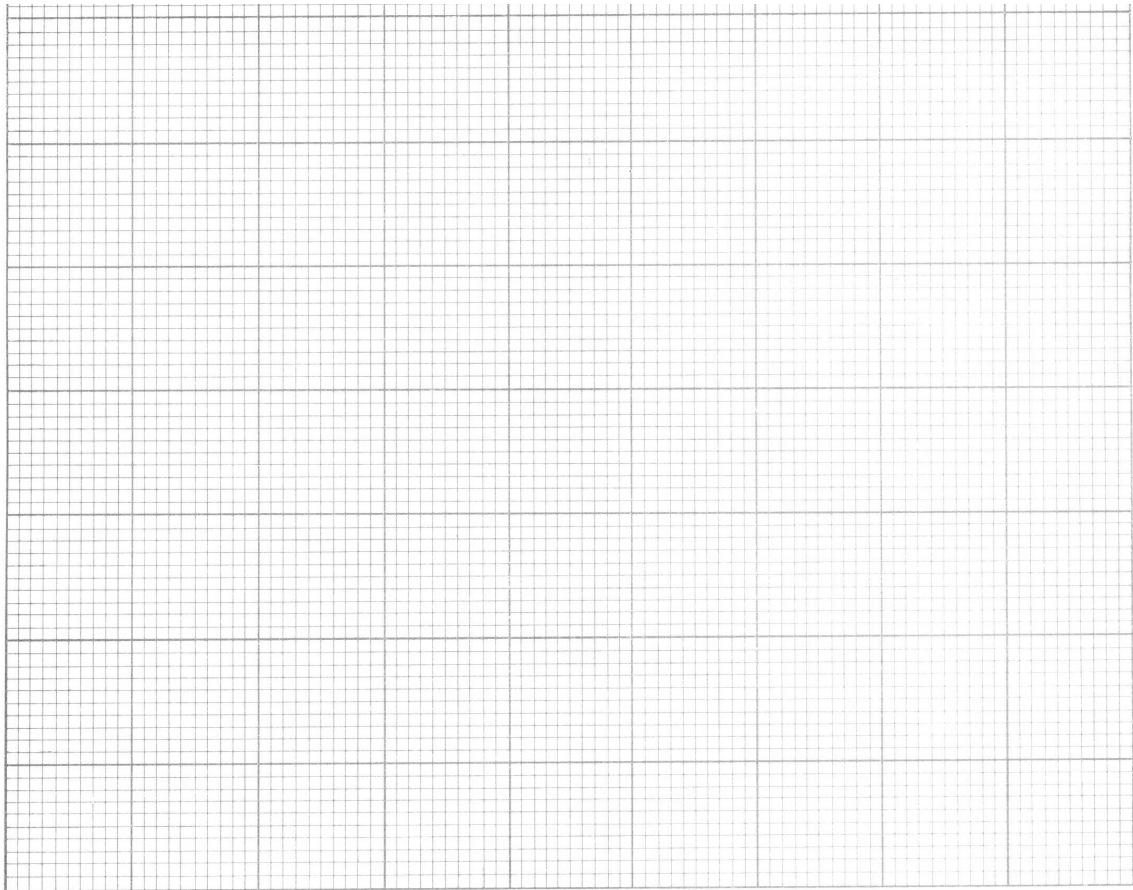
Grade:_____

C. Effect of temperature

- a. Heat 20 cm³ of water and 10 cm³ of solution A to approximately the following temperatures. Add 10 cm³ of solution B and record the maximum temperature of the solution attained and the time taken for it to turn pink.

Approx. temp. (° C)	15	20	25	30	35	40
Max. temp. attained (° C)						
Time (sec/min)						

- b. Plot a graph of temperature against time.



- c. From your graph, find the effect of temperature on the rate of the reaction.

ANEXO 5

ESPACIO VIRTUAL CON INFORMACIÓN GENERAL

ANEXO 5. ESPACIO VIRTUAL CON INFORMACIÓN GENERAL

Curso: Seminario ChemEC

https://cv4.ucm.es/moodle/course/view.php?id=66134

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
CAMPUS VIRTUAL

Seminario ChemECar

Mi Campus ► [seminario-invest-97176-1](#)

Mi Campus

- Área personal
- Páginas del sitio
- Mi perfil
- Curso actual
 - seminario-invest-97176-1**
 - Participantes
 - Insignias
 - General
 - Seguridad en ChemECar
 - Normativa del concurso
 - Guía metodológica para el diseño
 - Información práctica
 - Enlaces de interés
 - Tema 6
 - Tema 7
 - Tema 8
 - Tema 9
 - Tema 10
- Mi Correo
- Mis cursos

Administración

- Administración del curso
 - Activar edición
 - Editar ajustes
 - Usuarios
 - Filtros
 - Informes
 - Calificaciones
 - Resultados
 - Insignias
 - Copia de seguridad
 - Restaurar
 - Importar
 - Reiniciar
 - Banco de preguntas
- Cambiar rol a...
- Ajustes de mi perfil

Mis cursos

Novedades

AIChE ChemECar

Enlace directo a la página del concurso ChEmECar de AIChE,

Reglas regionales actualizadas

Seguridad en ChemECar

documentos, archivos, leyes, normas, consejos, cursos. Todo lo relativo a la seguridad útil

Guía de seguridad

Curso de seguridad en concurso de Chem E Car AIChE

Para practicar

tests

Normativa del concurso

Reglas, normas, plazos y procedimientos del concurso

Ejemplo de EDPModelDesign

El ejemplo es de los rimeros EDP no cumpliría la normativa actual en cuanto a la liberación de gases, pero sirve para ver cómo se elabora el EDP y lo que hay que incluir

Guía metodológica para el diseño

Guía metodológica para el diseño del ChemECar

Reactores electroquímicos

Información práctica

Reacciones químicas de impulsión y frenado

Cómo elaborar un póster

Enlaces de interés

Para el presupuesto. Indexmundi

Buscador de precios de reactivos


Buscar en la web y en Windows

VESPA MUSEUM SPACE

ANEXO 6

ESPACIO VIRTUAL DE MATERIALES

ANEXO 6. ESPACIO VIRTUAL DE MATERIALES





UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
CAMPUS VIRTUAL

Proyecto Chem-E-Car

[Mi Campus](#) ► [seminario-invest-6119-8](#)


[Material Bibliográfico online](#)

 [Materials Selection in Mechanical Design](#)


 [Tutorial de CES selector](#)

CES EduPack está instalado en el aula de informática de libre acceso de la 4ª planta de la Facultad de Físicas. Puede seros muy útil ver los vídeos de este tutorial a la vez que seguíis los mismos pasos con el programa.

Foro de discusión Chem-E-Car


 [Foro de discusión de selección de materiales del proyecto Chem-E-Car](#)


Introducing CES EduPack


 [Introducing CES EduPack](#)

Redes sociales profesionales - LinkedIn


Mi recomendación es que os abráis una cuenta en LinkedIn, ya que puede ser un punto de encuentro con profesionales de vuestra área de conocimiento a nivel mundial. Estos contactos pueden seros muy útiles en la última etapa de vuestra formación y una lanzadera al inicio de vuestra carrera profesional.

 [Granta Desing](#)


 [CES EduPack Alumni Group](#)

 [The Materials Selection Network](#)


Canal Youtube de Granta Desing

 [Canal Youtube](#)


Online webinars

 [Online Meetings](#)


Granta Twitter feed

 [Material Intelligence](#)


Redes sociales convencionales - Facebook

 [Granta Design on Facebook](#)

Granta eNewsletters

 [Granta eNewsletters](#)

GRANTA MI:Materials Gateway

 [GRANTA MI:Materials Gateway](#)

Material Bibliográfico online



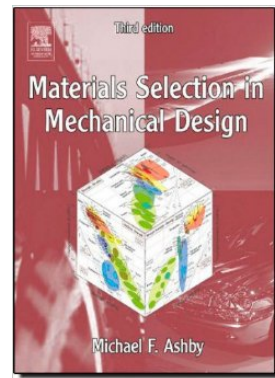
Materials Selection in Mechanical Design




Tutorial de CES selector

CES Edupack está instalado en el aula de informática de libre acceso de la 4ª planta de la Facultad de Físicas. Puede ser muy útil ver los vídeos de este tutorial a la vez que seguís los mismos pasos con el programa.


Libro de referencia en selección de materiales






El tutorial de CES Edupack selector ofrece gran cantidad de material docente, cubriendo las necesidades tanto de estudiantes principiantes en selección de materiales, como de ingenieros avanzados. El material es de muy alta calidad, muy bien estructurado y muy didáctico. Cubre todas las funcionalidades que ofrece el programa lo que facilita en gran medida el trabajo del ingeniero, haciendo posible análisis que no serían posibles de otro modo.

 CES EduPack Video Tutorials - Google Chrome
www.grantadesign.com/education/resources/videotutorials/2014/playlist.htm#tutorials-1

GRANTA
MATERIAL INSPIRATION

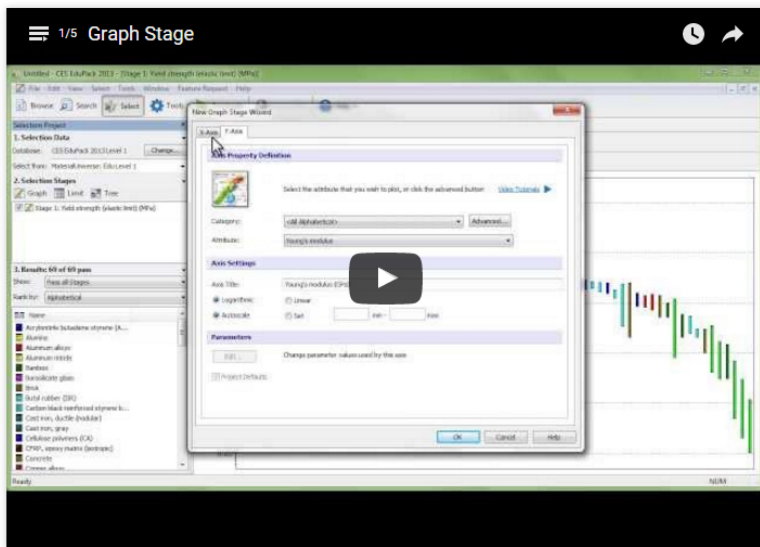
 **COMPANY** **PRODUCTS** **INDUSTRY** **EDUCATION** **SUPPORT** **CONTACT**

  LOGIN



CES EduPack Video Tutorials

[Back to video home >](#)



Charts


Selection

Advanced Users

Eco Design and Sustainability

Databases

More for: [EDUCATORS >](#) [STUDENTS >](#)

QUICK LINKS 

© GRANTA DESIGN 2015 ALL RIGHTS RESERVED | [LEGAL](#) | [COOKIES & PRIVACY](#)



Foro de discusión Chem-E-Car



Foro de discusión de selección de materiales del proyecto Chem-E-Car

Permite a los alumnos de los distintos grupos plantear sus dificultades y sus retos, que pueden ser discutidos entre ellos, con la participación del profesor.

Introducing CES EduPack



Introducing CES EduPack

Ofrece indicaciones sobre las posibilidades de la herramienta y a cerca de como trabajar con ella, promoviendo el trabajo en interdisciplinar y en equipo a nivel internacional.

Granta's teaching resources for materials and process education - Google Chrome
www.grantadesign.com/education/edupack/

GRANTA
MATERIAL INSPIRATION

COMPANY PRODUCTS INDUSTRY **EDUCATION** SUPPORT CONTACT

Search

Education > CES EduPack > Introducing CES EduPack

CES EduPack

- Introducing CES EduPack
- What's New?
- Editions
- Sample Content
- Eco Audit Tool
- Synthesizer Tool
- Licensing Options
- Training

Education Home
Download Info Pack

Introducing CES EduPack

CES EduPack supports and enhances your teaching of materials, engineering, design and sustainability. It provides a comprehensive database of materials and process information, powerful materials software tools, and a range of supporting textbooks, lectures, projects, and exercises.

With specialist Editions for specific disciplines, and three levels of the database and software to suit varying needs in all years of undergraduate study and postgraduate teaching, EduPack is a curriculum-wide resource. It is continually developed based on feedback from the global user community.

[Download a PDF Overview >](#)

CES 2016 EDUPACK

What's new in CES EduPack 2016? >

Meet us online >

Supporting materials-related education across science, design, and sustainability

Visualizing material properties

Matching materials to applications


QUICK LINKS webex

© GRANTA DESIGN 2015 ALL RIGHTS RESERVED | LEGAL | COOKIES & PRIVACY

You can follow us on: f in t @

Redes sociales profesionales - LinkedIn

Mi recomendación es que os abráis una cuenta en LinkedIn, ya que puede ser un punto de encuentro con profesionales de vuestra área de conocimiento a nivel mundial. Estos contactos pueden seros muy útiles en la última etapa de vuestra formación y una lanzadera al inicio de vuestra carrera profesional.

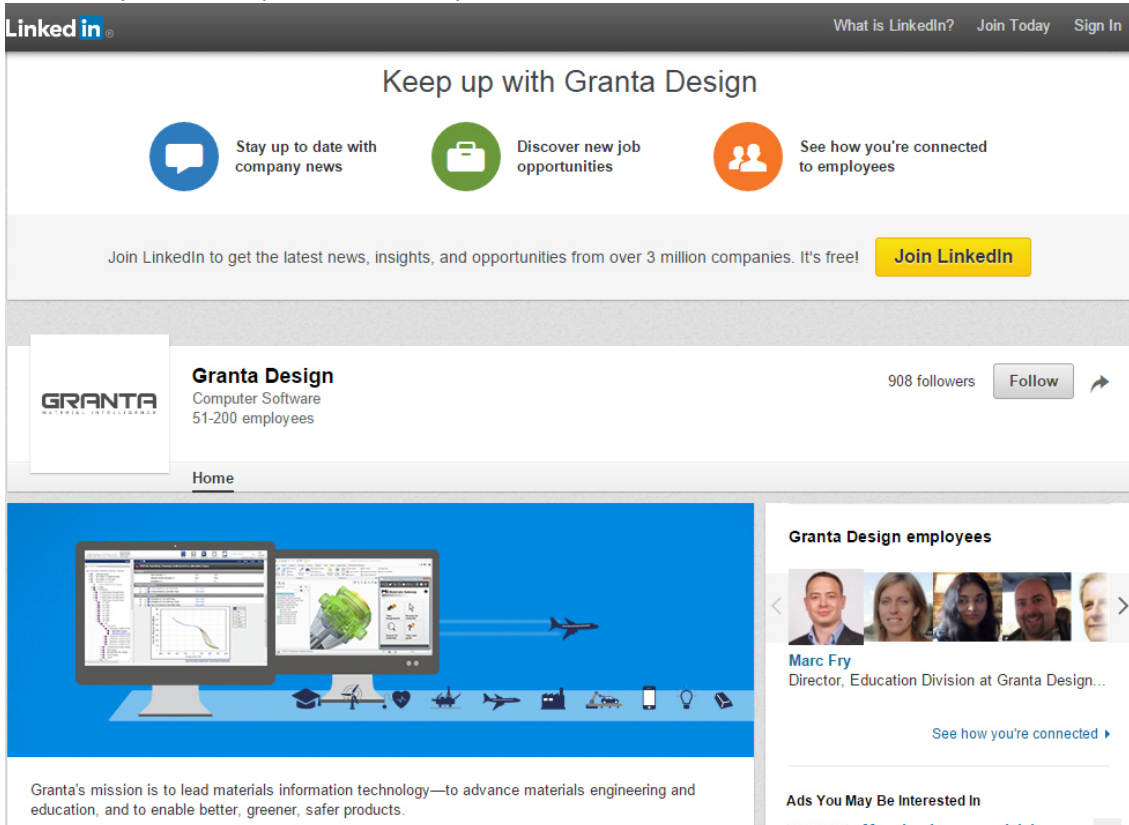
 [Granta Design](#)

 [CES EduPack Alumni Group](#)

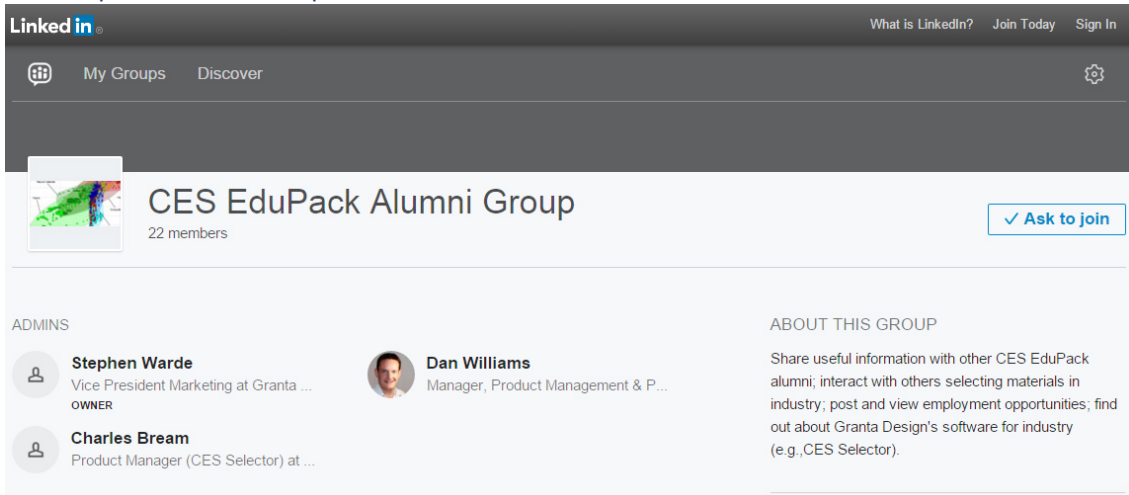
 [The Materials Selection Network](#)

Granta Design


Como se ve en la imagen incluye noticias de empresas que trabajan en el área, ofertas laborales y contactos profesionales especializados.




CES EduPack Alumni Group



The Materials Selection Network

What is LinkedIn?Join TodaySign In

My GroupsDiscover





The Materials Selection Network

2,096 members

[✓ Ask to join](#)

ADMINS


**Dan Williams**
Manager, Product Management & P...
OWNER

**Stephen Warde**
Vice President Marketing at Granta ...

ABOUT THIS GROUP

A networking and discussion group for professionals with an interest in all aspects of material, coating and process selection for engineering and design applications - including techniques for cost optimization, equivalence, substitution and environmental compliance.

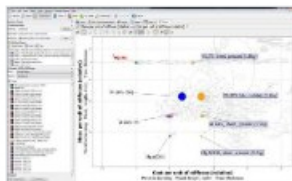
Un ejemplo de discusión en el grupo es el siguiente:

**Dan Williams**
Manager, Product Management & Product Marketing at Granta Design
OWNER

4mo



Some interesting case studies here about material selection for reduced cost.


Cambridge, UK – September 17, 2015. Granta Design today announced the release of CES Selector™ 2016, which includes an innovative tool to consider the cost implications of material and process choices, more extensive datasets, and more attractive and...



CES Selector 2016 – materials decisions for lower-cost, better-performing products

Cambridge, UK – September 17, 2015. Granta Design today announced the release of CES Selector™ 2016, which includes...

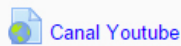
[Like](#) [Comment](#) |  2  1

**Carl Ziegler** looks useful, too often I see materials chosen on material cost with no taking into account machining, heat treatment, welding procedure qualifications (both build and repair) interactions, potential for out of specification process plant operation etc. I doubt this will take all that into account or does it?

[Like](#)

2w

Canal Youtube de Granta Desing



Incluye abundante material y casos de estudio.

Granta Design - YouTube - Google Chrome

<https://www.youtube.com/user/GrantaDesign>

YouTube ES

Search: [] Upload Sign in

Granta Design [Subscribe](#) 221

Home Videos Playlists Channels About

Why is Materials Education ...
2,833 views 1 year ago
An overview of how Granta provides resources and support for anyone teaching materials or related topics across the full range of disciplines in engineering, science, and design.

Other Granta Design Channels
[CESEduPackTutorials](#) [Subscribe](#)

Introducing Granta
What is the value of materials data management?
by Granta Design
2 years ago • 3,020 views
An overview of Granta Design and how its materials information technology helps organizations in industry sectors such as aerospace, energy,...

Online webinars



Son gratuitos y permiten preguntar dudas al ponente y discutir con el resto de asistentes. A modo de ejemplo vease la siguiente captura de pantalla:

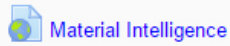
Events by Program

[View Events by Date](#) | [View Event Recordings](#)

English : London Time

Date & Time		Topic	Panelist
<input type="checkbox"/> Show past events <input type="checkbox"/> Show only events that require registration			
Getting Started Webinars We will be running a series of hour-long webinars over the summer for academics at universities and colleges that use the CES EduPack. Designed to help you make the most out of what you already have; they will show how to use the basic functionality, demonstrate relevant case studies and explain where you can find more questions with worked solutions and other help. Each webinar will have time scheduled for questions and answers and we hope that you will be able to share your ideas on how to get the most out of the EduPack with your colleagues around the world. These webinars are not open to students or those that do not yet have the CES EduPack. Please use your university email address when registering for log in details. These webinars are free.			
Granta Design Academic Webinars			
Jan 28, 2016 4:00 pm		Engaging Students in Materials with CES EduPack 2016	Register
Feb 2, 2016 9:00 am		Verstofflehre – angewandt und interaktiv	Register
Feb 3, 2016 4:00 pm		Comment susciter l'intérêt des étudiants pour les matériaux avec CES EduPack 2016? More...	Register
Granta Design Webinars			
Jan 26, 2016 10:00 am		Introducing new materials into aerospace applications	Register
Jan 26, 2016 5:00 pm		Introducing new materials into aerospace applications	Register
Feb 4, 2016 10:00 am		Down selection / Pre-screening of Materials More...	Register

Granta Twitter feed



Con mucha información de eventos y contactos relacionados con la selección de materiales en ingeniería.

Granta Design (@GrantaDesign) | Twitter - Google Chrome

inc. [US] <https://twitter.com/GrantaDesign>

Inicio Sobre nosotros Buscar en Twitter ¿Tienes cuenta? Iniciar sesión

MATERIAL INTELLIGENCE

TWEETS 588 SIGUIENDO 227 SEGUIDORES 409 ME GUSTA 28 Seguir

Granta Design
@GrantaDesign
The materials information technology experts. News and events from Granta Design. For customer support, please email support@grantadesign.com
Cambridge, UK
grantadesign.com
Se unió en abril de 2012
63 fotos y videos

Tweets Tweets y respuestas Fotos y videos

Granta Design @GrantaDesign · 5 h
Great materials information projects presented at @grantadesign's 24-hour #GrantaMayfly

Granta Design @GrantaDesign · 18 ene.
Thanks Boeing for hosting a great Material Data Management Consortium meeting. More on MDMC buff.ly/1RwdlqT

¿Eres nuevo en Twitter?
¡Regístrate ahora para obtener tu propia cronología personalizada!
[Regístrate](#)

También te puede gustar · Actualizar

- CambridgeConsultants @CambConsultants
- KTN Materials @KTNUK_Materials
- Materials World @materialsworld
- NCC @NCCUKInfo
- TWI @TWI_Ltd

Redes sociales convencionales - Facebook



Con mucha información de eventos y contactos relacionados con la selección de materiales en ingeniería.

Facebook interface showing the Granta Design Company page. The page includes a cover photo with a banner reading "Granta Design is on Facebook. To connect with Granta Design, sign up for Facebook today." and a profile picture of a blue square with a white 'G'. The page has 490 likes and 75 visits. The timeline shows a post from 18 January at 08:46, thanking Boeing for hosting a Material Data Management Consortium (MDMC) meeting in Huntington Beach, CA, USA. The post includes a photo of a group of people standing in front of a building with a "BOEING CONFERENCE CL" sign.

Facebook interface showing the Granta Design Company page. The page includes a cover photo with a banner reading "Granta Design is on Facebook. To connect with Granta Design, sign up for Facebook today." and a profile picture of a blue square with a white 'G'. The page has 490 likes and 75 visits. The timeline shows a post from 18 January at 08:46, thanking Boeing for hosting a Material Data Management Consortium (MDMC) meeting in Huntington Beach, CA, USA. The post includes a photo of a group of people standing in front of a building with a "BOEING CONFERENCE CL" sign.

GRANTA MI:Materials Gateway



GRANTA MI:Materials Gateway

Pone a disposición de los alumnos la posibilidad de conectar la información conseguida en el proceso de selección de materiales con software de diseño 3D asistido por ordenador y de simulación por elementos finitos entre otros, dándole una mayor potencialidad al proyecto a realizar.

PRODUCT OVERVIEW

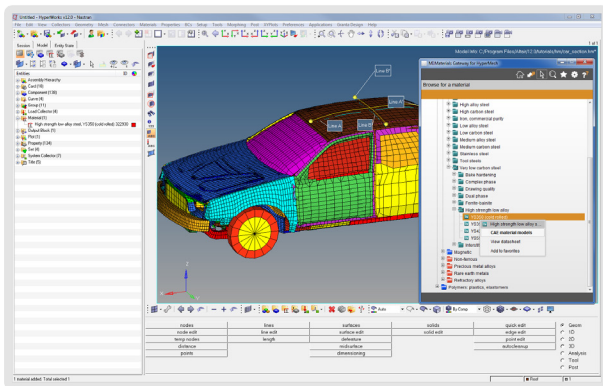
GRANTA
MATERIAL INTELLIGENCE

GRANTA MI: Materials Gateway

Materials information, when and where you need it

You need accurate materials property data for product design, analysis, and simulation. GRANTA MI:Materials Gateway lets you access and apply this vital data, quickly and traceably, within CAD, CAE, or PLM.

GRANTA MI™ is the leading system for materials information management in engineering organizations. It enables companies to control, analyze, and securely share critical corporate data on materials and processes, managing the materials information lifecycle. Alongside this proprietary data, GRANTA MI provides a comprehensive library of reference data covering many categories of properties for metals, plastics, ceramics, composites, and natural materials.

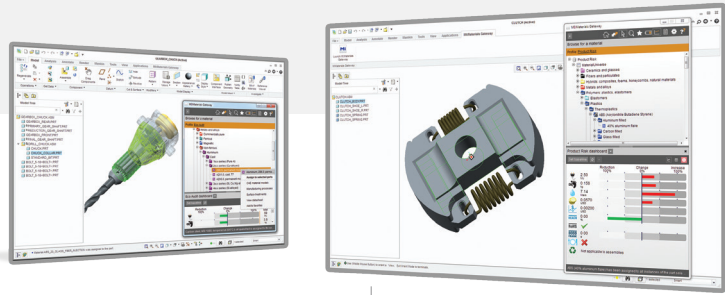


Accessing materials data within the HyperMesh simulation software. The GRANTA MI:Materials Gateway window opens within HyperMesh, enabling users to browse and search the corporate materials database, find relevant materials models, and import them for use in simulation.

MI:Materials Gateway is a GRANTA MI module that enables you to access all of this information from within your CAD, CAE, or PLM system. The data can then be applied within that system: assigning materials properties to parts in a CAD model to enable accurate mass roll-ups; importing validated materials model for CAE; or enabling dashboards to guide material and process decisions.

Latest: Version 3.1

Version 1 established MI:Materials Gateway as the standard for accessing managed materials data within product design and simulation software. Second and third generations brought enhanced ease-of-use and productivity and even better insights into the materials assigned. Version 3.1 ensures that material choices specified in CAD can be easily accessed in CAE, ensuring consistency, and supporting collaboration between design and simulation departments.



GRANTA **mi**
MATERIAL INTELLIGENCE

Key features

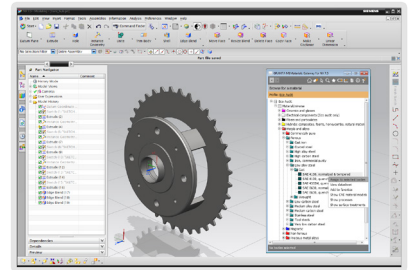
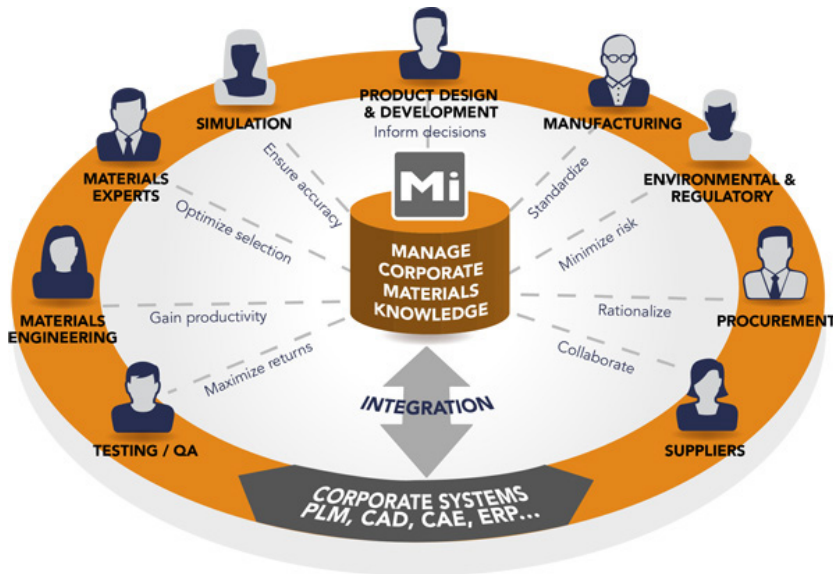
- Quick, traceable access to corporate materials data and authoritative materials reference information within your routine engineering software
- Manage materials knowledge for PLM
- Assign materials and guide selection in CAD
- Direct access to valid materials models for CAE

Support for:

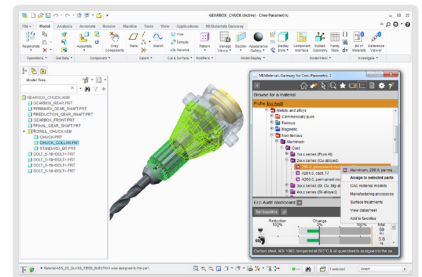
- Abaqus/CAE®
- ANSYS Workbench®
- Autodesk Inventor®
- CATIA®
- Creo®
- HyperMesh®
- NX®
- Teamcenter®
- Windchill®

Why GRANTA MI:Materials Gateway?

Materials data is 'living' data. It is constantly evolving as new tests, analyses, and research are carried out, or as reference sources are updated. Effective management of this information lifecycle requires the specialist tools of GRANTA MI (illustrated, below), the leading materials information management system. MI:Materials Gateway integrates GRANTA MI seamlessly with your existing CAD, CAE, or PLM tools.



Direct access to property data for CAD or materials models for CAE; here, within the NX system



Embedded tools can search materials data, select materials, or support eco design; pictured, an eco impact dashboard in Creo

Get the right materials data... fast and error-free

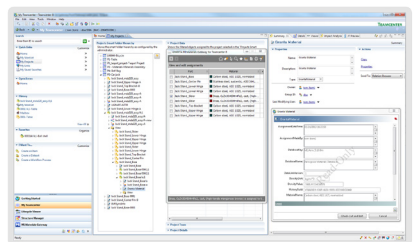
Within the CAD, CAE, or PLM system, open the MI:Materials Gateway window to browse or search your company's materials database. GRANTA MI security features ensure that users see only data that they are authorized to see. Click on your chosen material and the property data or CAE materials models that you need are immediately available in the host software, quickly and with full traceability.

Apply the data in CAD, CAE, or PLM

Now it is simple to apply the materials data that you found. In a single button-click, you can assign a material to specific parts in your CAD model, or import a material model for use in CAE simulation. MI:Materials Gateway dashboards combine this materials data with product model information from your CAD or PLM system (e.g., part volumes or surface areas), enabling interactive analyses of factors such as product mass, restricted substance risk, or environmental impact to guide material selection and substitution.

Integrate 'live' data, with full traceability

MI:Materials Gateway retains full traceability to the 'live' materials data in your GRANTA MI database. When you assign a material to a part in CAD or CAE, information is captured not only about which material record in the GRANTA MI database was used, but also about which version of that record. And via the live connection to the material record in the database, at any time you or other authorized users can access additional data for, e.g., non-linear simulation or cost analysis.



Materials knowledge integrated within PLM systems supports costing, environmental, or other specialists reviewing products or analyzing product families; pictured, reporting materials assignments in Teamcenter

Unrivalled materials data

CAD and CAE users can also access a comprehensive library of materials reference data. This includes Granta's unique MaterialUniverse™ and authoritative data from leading providers on plastics, metals, and composites.

Full listing: grantadesign.com/products/data/



www.grantadesign.com | info@grantadesign.com

UK/World
+44 (0)1223 518895

USA
1-800-241-1546

Germany
0800 182 5026

France
08 00 76 12 90

GWY-15-06

© 2015 Granta Design Limited. GRANTA MI, MI:Materials Gateway, and MaterialUniverse are trademarks of Granta Design

ANEXO 7

RESULTADOS DEL EQUIPO DE TRABAJO 1

INFORME DEL TRABAJO EXPERIMENTAL DEL GRUPO 1.

ANTECEDENTES

Se debe diseñar y construir un coche que sea propulsado y detenido por reacciones químicas.

El mecanismo de propulsión seleccionado es la construcción de una batería de cinc y cobre, la cual estará conectada a un motor que propulse el coche. Como novedad en este mecanismo se ha elegido sustituir el puente salino por una membrana de nanocelulosa bacteriana.

El mecanismo de parada es una reacción de reloj de yodo en la que el tiempo que demora en cambiar de color depende de las concentraciones iniciales de los reactivos. La reacción de reloj para detener el coche usará un fotosensor que detecte el cambio de cantidad de luz y con un relé abra el circuito de la pila, deteniendo el motor.

En estos laboratorios los alumnos se dividirán en dos grupos, unos que trabajen en el mecanismo de propulsión, y otros que trabajen en el mecanismo de parada.

DESCRIPCIÓN DE LA EXPERIMENTACIÓN

Mecanismo de propulsión: Pila Zn/Cu

Objetivo de la experimentación: comprobar que la batería funciona de manera adecuada, cuál es su potencial práctico, cómo afecta al potencial al colocar diverso número de celdas en serie, determinar las sobretensiones, y el efecto de diferentes concentraciones de las disoluciones de sulfato de cada metal.

Se probaron diferentes concentraciones de en la pila y se observó que el potencial no varió con la concentración de $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ y $\text{CuSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. El potencial fue en torno a una décima parte del necesario para accionar el motor eléctrico, por lo que se deben colocar varias celdas en serie.

Se probó a sustituir el puente salino por una membrana de nanocelulosa bacteriana y se observó que la resistencia a la corriente de ésta última era menor que la del puente salino, lo que permite reducir el número de celdas a seis.

Se diseñó el conjunto de las seis celdas eléctricas y se ha solicitado su construcción.

Mecanismo de parada: Reacción Reloj con Vitamina C

Se estudió la cinética de la reacción de yodo siguiendo el protocolo descrito en el guión de prácticas. Se estudió el efecto de las concentraciones de ácido ascórbico y KI sobre el tiempo de reacción y se tabularon las concentraciones necesarias para cada tiempo, buscando obtener datos de concentraciones para tiempos entre 0 y 120 segundos, que es el límite de tiempo que debe recorrer el coche.

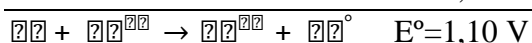
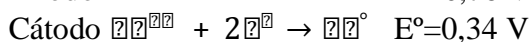
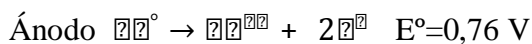
Para los primeros ensayos se emplearon pastillas efervescentes de vitamina C, ya que aún no se disponía del reactivo.

En este laboratorio se estudió la cantidad mínima de almidón necesaria para la reacción empleando un espectrofotómetro UV. Se tabuló la concentración de almidón vs la absorbancia a 500 nm. La cantidad de almidón dependerá de la sensibilidad de fotodetector que se emplee.

RESULTADOS

Mecanismo de propulsión: Pila Zn/Cu

La reacción de propulsión se realiza con una reacción redox que oxida el cinc y reduce el cobre. Atendiendo las siguientes ecuaciones:



Entre las disoluciones se coloca un puente salino de Na₂SO₄ o KNO₃ para permitir el paso de electrones entre las disoluciones, usando lana de vidrio para mantener la disolución dentro del puente.

Las cantidades usadas de cada reactivo se calculan según:

$$\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} \quad 0.1\text{M} = \frac{0.1 \text{ mol/L} \cdot 0.25 \text{ L}}{0.025 \text{ L}} \rightarrow \text{masa (g)} = 28.755 \text{ g de ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

$$\text{CuSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} \quad 0.1\text{M} = \frac{0.1 \text{ mol/L} \cdot 0.25 \text{ L}}{0.025 \text{ L}} \rightarrow \text{masa (g)} = 28.572 \text{ g de CuSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$$

$$\text{Na}_2\text{SO}_4 \quad 0.1\text{M} = \frac{0.1 \text{ mol/L} \cdot 0.25 \text{ L}}{0.025 \text{ L}} \rightarrow \text{masa (g)} = 14.202 \text{ g de Na}_2\text{SO}_4$$

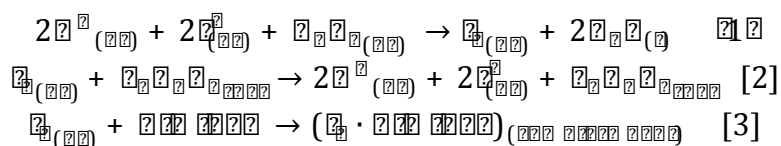
$$\text{KNO}_3 \quad 0.1\text{M} = \frac{0.1 \text{ mol/L} \cdot 0.25 \text{ L}}{0.025 \text{ L}} \rightarrow \text{masa (g)} = 10.110 \text{ g de KNO}_3$$

También en vez de puentes salinos se probó el uso de una membrana de celulosa a fin de evitar el uso de puentes salinos que resultan difíciles de preparar, pesados y poco confiables.

Tras la experimentación se comprueba que el potencial experimental de la pila es de 1.07 V, bastante cercano al valor teórico. Usando membranas en vez de puentes salinos se obtienen potenciales similares, por lo que se decide que el uso de membranas es favorable. La dilución de las soluciones salinas de ZnSO₄·7H₂O y CuSO₄·7H₂O no afecta el potencial de la pila. Colocar las pilas en serie aumenta el potencial a 1.87 V con dos pilas en serie.

Mecanismo de parada: Reacción Reloj con Vitamina C

El mecanismo de parada del coche se basa en una reacción reloj de yodo, que consiste en tres reacciones en serie:



Las primeras dos reacciones influyen en la velocidad de reacción. La tercera es una reacción instantánea que ocurre tan pronto como se agota toda la vitamina C. Tras la experimentación se obtuvo que las cantidades ideales de cada reactivo son las siguientes:

Disolución de peróxido y almidón: se añaden 50 mL peróxido al 6% m/v y 250 mL de agua con almidón en exceso obteniendo un volumen final de 300 mL.

Disolución de KI: se añaden 9 g de yoduro y 250 ml de agua.

Disolución de Vitamina C: se añaden 1 g Vitamina C en 125 mL de agua.

Para realizar la reacción primero se añaden 14 mL la disolución de yoduro y 10 mL de la de vitamina C. Luego se añaden 30 mL de la disolución de peróxido y a partir de ese momento se empieza a tomar el tiempo hasta el cambio de color. La disolución final tiene un volumen de 54 mL. Y las concentraciones iniciales de cada reactivo son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 [H_2O_2] &= \frac{6}{100} \times \frac{50}{38} \times \frac{1}{54} \times \frac{1000}{1} = 1.462 \\
 [KI] &= \frac{9}{166} \times \frac{1}{54} \times \frac{1000}{1} = 1.004 \\
 [Vitamina\ C] &= \frac{1}{176.13} \times \frac{1}{54} \times \frac{1000}{1} = 0.107
 \end{aligned}$$

La concentración de almidón no se calcula pues no interviene en la velocidad de reacción y suele colocarse en exceso para obtener un color azul oscuro en vez de marrón claro.

CONCLUSIONES

Tras los múltiples experimentos realizados es posible obtener varias conclusiones de los mecanismos que se utilizaran para la elaboración del coche.

En el mecanismo de propulsión se ha observado que la variación de la concentración de las disoluciones no afecta el potencial de la pila, por lo que se usaran concentraciones de 0.1 M de cada disolución.

Al comparar los resultados entre el uso de puentes salinos y el uso de membranas de celulosa no se observa diferencia en el potencial de la pila. El uso de membranas presenta ventajas frente al uso de puentes salinos, las membranas ocupan menos espacio, no requerimos de una tercera disolución como en el puente salino, son mas fáciles y confiables de usar, permiten el paso de electrones con tan solo estar en contacto con ambas disoluciones y permite reducir el peso del coche. Por estas razones se usaran las membranas de celulosa para la construcción de la pila.

En el mecanismo de parada se observa que la variación de peróxido y de yoduro presentan una variación de la velocidad de reacción no lineal y difícil de predecir. En cambio la variación de la vitamina C presenta una variación lineal del tiempo de

reacción frente a la concentración, y es fácil de predecir de manera precisa por lo que es la variable ideal para modificar.

En los próximos laboratorios se realizara el diseño del coche, su construcción y la experimentación necesaria para determinar de manera fiable la distancia recorrida frente a la variación de la concentración de vitamina C.

ANEXO 8

RESULTADOS DEL EQUIPO DE TRABAJO 2

INFORME DEL TRABAJO EXPERIMENTAL DEL GRUPO 2.

DESCRIPCIÓN DEL TRABAJO REALIZADO POR EL EQUIPO 2

En un primer momento se ensayó una reacción enzimática, hidrólisis de ONPG, que sirviese para propulsar el vehículo y para controlar su parada al mismo tiempo. Sin embargo, como consecuencia de los resultados cinéticos obtenidos, se decidió emplear un sistema diferente para la propulsión y la parada del vehículo.

El mecanismo de propulsión seleccionado es una pila galvánica, conectada a un motor que propulse el coche.

El mecanismo de parada es una reacción de reloj de formaldehído conectado a un interruptor óptico de robot Arduino.

En lo que se refiere al trabajo en laboratorio, se avanza en paralelo en el diseño de la pila galvánica, para impulsión, en la modelización y distribución de módulos en el ChemECar, y en la cinética de la reacción de parada, ya que ésta es la que determinará que el coche frene dentro de la zona de operaciones, seleccionándose reacciones que se dan a temperatura ambiente.

Se ha estudiado una de ellas, la hidrólisis enzimática de ONPG en diversas condiciones experimentales y determinando el modelo cinético, siguiendo el protocolo descrito en el guión de prácticas y empleando el formato de cuaderno de laboratorio desarrollado como material docente en este proyecto. Esto ha permitido estimar cómo se comportará el sistema en las condiciones de concurso (tras medir temperatura ambiente), paso previo al ajuste de concentraciones de reactivos y, en su caso, catalizador.

Con el material de seguridad adecuado (batas, gafas, guantes), han procedido a preparar soluciones, hacer mezclas y observar evolución de color a simple vista a hacerlo de forma más precisa en espectrofotómetro

En el caso de la reacción enzimática de ONPG, se ha implementado un sistema de medida de absorbancia in-situ, operando a varias temperaturas, concentraciones de enzima y de sustrato tanto en matraz como en cubeta espectrofotométrica (cuando los ensayos previos permitían conseguir condiciones para seguir la cinética de forma fidedigna). En este caso, se ha conseguido y se ha aplicado el software Aspen Custom Modeler para obtener un modelo cinético que permite describir la evolución química del sistema en función de la temperatura y de la concentración de sustrato, a una concentración de catalizador fija. De esta forma se fijaron las condiciones de concentración adecuadas de reactivos para entrar en tiempo de concurso (2 minutos).

Se llegó a modelos cinéticos aplicables en las condiciones de concurso. Sin embargo, se decidió emplear otra reacción de parada puesto que la cinética de la reacción enzimática mostraba cierta complejidad a la hora de controlar de forma exacta la distancia recorrida por el prototipo. Se está estudiando con la misma forma de proceder otras reacciones de parada, diversas reacciones tipo reloj, empezando por la de formaldehído (basada en el viraje brusco de un indicador).

Por otro lado, los estudiantes de ingeniería de materiales que forman parte del equipo se están centrando en el manejo del robot Arduino para construir un interruptor óptico, y con ayuda de diversos técnicos de la Facultad de Físicas y del CAI de Electrónica, están aprendiendo a implementar programas en C++ para el control de este sistema

electrónico que se ha de acoplar, en fechas próximas, a un sistema de emisión de luz (LED) y captación de la misma (fotodetector) acoplado al reactor donde se llevarán a cabo las reacciones de parada.

Algunos de los resultados obtenidos se muestran en las figuras 1 -3.

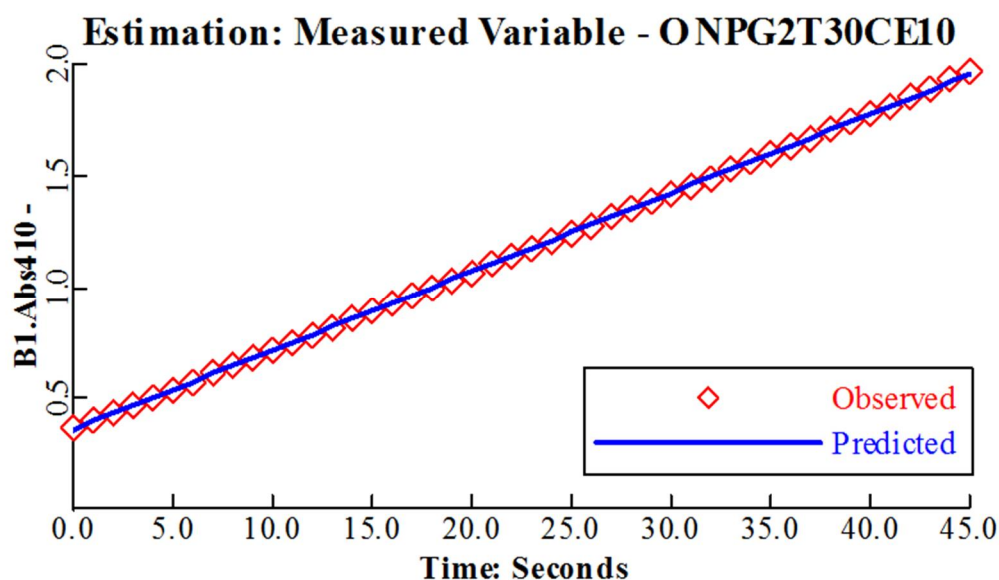


Figura 1. Ajuste de la absorbancia de la reacción enzimática al modelo cinético cuando la cantidad de encima es de 10 μ l. 30°C

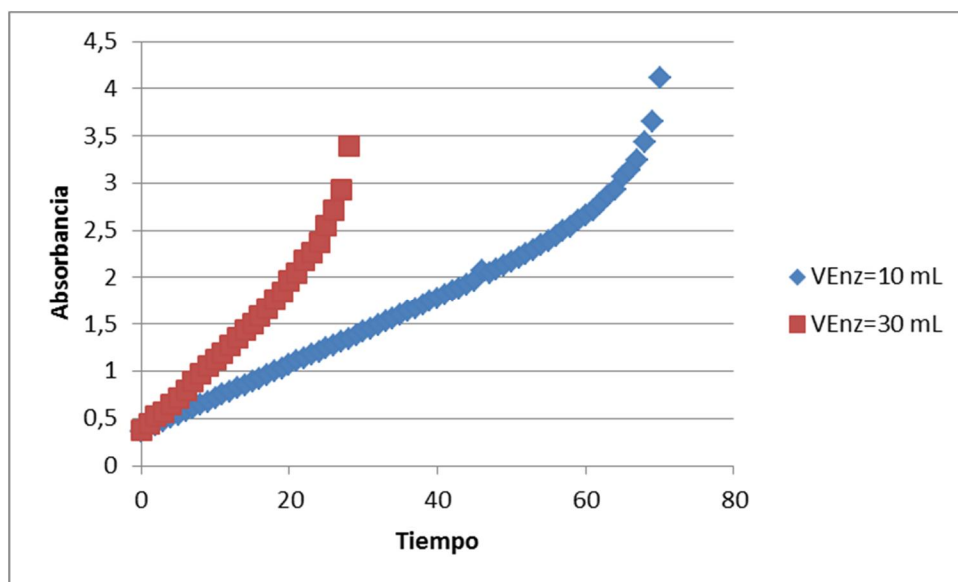


Figura 2. Absorbancia de la reacción enzimática a diferentes cantidades de enzima 30°C.

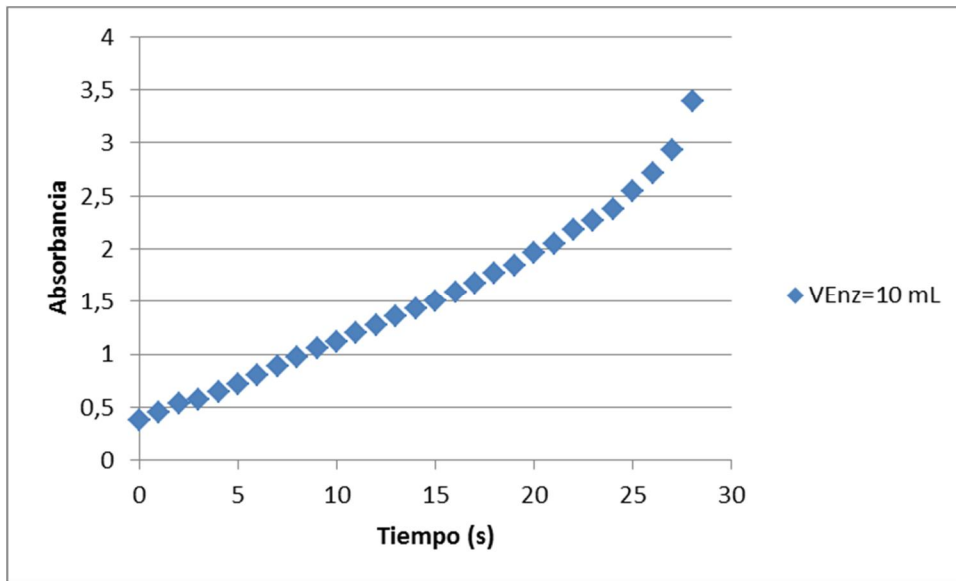


Figura 3. Absorbancia de la reacción enzimática cuando la cantidad de encima es de 10 ml. 35°C